



Universidad Nacional

SAN LUIS GONZAGA



Reconocimiento-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional

Esta licencia permite a otras combinar, retocar, y crear a partir de su obra de forma no comercial, siempre y cuando den crédito y licencia a nuevas creaciones bajo los mismos términos.

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0>

UNIVERSIDAD NACIONAL “SAN LUIS GONZAGA”
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA



***“Análisis dinámico y estado estacionario del bucle de control
en la columna de destilación azeotrópica
del proceso de producción del monómero de acetato de vinilo”***

LINEA DE INVESTIGACIÓN:
Ciencias naturales, ingeniería y tecnologías sostenibles

TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: Bach. LARA QUISPE, Leandro Deivis

ASESOR: Dr. FERNANDO EDUARDO CANO LEGUA

Ica, Perú

2025

DEDICATORIA

A Dios, por ser mi guía espiritual y bendecirme con las oportunidades de volverme mejor persona.

A mis padres, por su amor incondicional e inculcarme el valor del esfuerzo y perseverancia.

A mi esposa e hijo, motor de mi vida y fuente inagotable de inspiración en mi dedicación diaria.

A mi familia entera y en especial a Tezza, por su apoyo inquebrantable y por creer en mí en los momentos de mayor desafío.

Este logro es también de ustedes, pues sin su presencia constante, no habría sido posible.

AGRADECIMIENTOS

Expreso mi agradecimiento a mi asesor de tesis, Dr. Fernando Eduardo Cano Legua, y al Dr. Rosalio Cusi Palomino, por ser guía y motivarme en toda mi etapa universitaria.

A los docentes de mi facultad Ingeniería Química y Petroquímica, por el espacio académico y herramientas brindadas para la culminación de este trabajo.

Agradezco con todo mi corazón a Dios, mi esposa e hijo, mi familia, que son el motor de mi vida.

Índice de Contenidos

	Pág.
Dedicatoria	ii
Agradecimientos	iii
Índice de Contenidos	iv
Índice de Tablas	vi
Índice de Figuras	vii
Resumen	ix
Abstract	x
I. INTRODUCCIÓN	01
II. ESTRATEGIA METODOLÓGICA	05
2.1. Diseño de procesos y configuración de control base	05
2.1.1. Cinética de reacción	05
2.1.2. Descripción del proceso	07
2.1.3. Objetivos generales de control	11
2.1.4. Diseño de la estrategia de control base de toda la planta	12
III. RESULTADOS	17
3.1. Desarrollo de modelos	17
3.2. Desarrollo de modelos termodinámicos	17
3.3. Desarrollo de modelos matemáticos	20
3.3.1. Ecuaciones de conservación y retención	21
3.3.1.1. Modelado de columnas de destilación	21
3.3.1.2. Modelado de reactores de flujo de pistón de lecho fijo	23
3.3.2. Estrategia de integración	26
3.4. Desarrollo del control ActiveXTM de reacción cinética	27
3.5. Supuestos del modelo	28
IV. DISCUSIÓN	30
4.1. Estado estacionario y análisis dinámico de destilación azeotrópica	30

4.2.	Análisis de estado estacionario	30
4.2.1.	Selección del control de temperatura de etapa	30
4.2.2.	Multiplicador de entrada	33
4.2.3.	Matriz de ganancia relativa y análisis del índice de Niederlinski	37
4.2.4.	Resumen del análisis de estado estacionario	41
4.3.	Análisis dinámico	41
4.3.1.	Selección del emparejamiento del bucle de control de composición	42
4.3.2.	Sintonización	45
V.	CONCLUSIONES	47
VI.	RECOMENDACIONES	48
VII.	REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	49

Índice de Tablas

Tabla 1 Parámetros operativos clave de la unidad de proceso	10
Tabla 2 Información clave de clasificación de unidades de proceso	10
Tabla 3 Emparejamientos de variables controladas y manipuladas	14
Tabla 4 Ecuaciones de resistencia para operaciones unitarias seleccionadas	27
Tabla 5 Ganancia de bucle abierto del elemento K11	38
Tabla 6 Ganancia de lazo abierto del elemento K11 del emparejamiento de control inverso	39
Tabla 7 Parámetros clave del bucle de control	46

Índice de Figuras

Fig. 1 Diagrama de flujo de bloques para el diseño del proceso de monómero de acetato de vinilo	7
Fig. 2 Diagrama de flujo del diseño del proceso de monómero de acetato de vinilo	8
Fig. 3 Estrategia básica de control para toda la planta	13
Fig. 4 Modelo de etapas de columna de destilación	22
Fig. 5 Representación gráfica del modelo de retención	25
Fig. 6 Estrategia de control de la base de la columna de destilación azeotrópica	31
Fig. 7 Sensibilidad a la temperatura de la bandeja de estado estacionario a los cambios en la carga del rehervidor en circuito abierto.	31
Fig. 8 Perfiles de composición de etapa en estado estacionario de VAM para un cambio de paso de ± 5 °C en el punto de operación de la etapa 14 de 99 °C.	32
Fig. 9 Comportamiento en estado estacionario de bucle abierto de la fracción molar de agua de corriente de fondos y VAM y temperatura de la etapa 14 para la columna de destilación azeotrópica	33
Fig. 10 Respuesta inversa de bucle abierto de la composición H ₂ O de los fondos a un aumento de 200 kg/h en el caudal másico de reflujo	34
Fig. 11 Respuesta de bucle abierto no lineal: pequeño cambio de paso en el reflujo Caudal ($\pm 0,009\%$) a partir de la fase 14 Temperatura Punto de funcionamiento de 99 °C	35
Fig. 12 Respuesta de bucle abierto no lineal: cambio de paso de tamaño mediano en el flujo de reflujo ($\pm 0,9\%$) a partir del punto de operación de temperatura de la etapa 14 de 99°C	36
Fig. 13 Emparejamiento de bases para bucles de control de destilación azeotrópica en respuesta a una caída del flujo de alimentación del 40 % durante 5 minutos	43

Fig. 14 Emparejamiento inverso para bucles de control de la columna de destilación azeotrópica en respuesta a una caída del flujo de alimentación del 40% durante 5 minutos.

44

RESUMEN

La industria química juega un papel importante en las economías de casi todos los países del mundo y en la vida de sus ciudadanos. Dichas industrias son diversas en sus objetivos de fabricación que van desde la producción de productos farmacéuticos hasta agrícolas y plásticos.

Estas industrias proporcionan una inyección de capital y empleo en las comunidades locales a través de la producción de componentes químicos clave que componen productos domésticos e industriales comunes.

Sin la presencia de tal industria, nuestras vidas estarían desprovistas de muchas necesidades y comodidades que damos por sentadas.

Dada la importancia de la industria química, es imperativo ampliar el conocimiento y la comprensión de cómo construir y operar una instalación de producción química de manera segura y económica para beneficiar a la sociedad en su conjunto.

Palabras clave: Destilación azeotrópica, Producción del monómero de acetato de vinilo, Análisis dinámico y estado estacionario.

ABSTRACT

The chemical industry plays a vital role in the economy of almost every country in the world and in the lives of their citizens. These industries serve a variety of purposes in manufacturing, from pharmaceutical manufacturing to agricultural products and plastics.

These industries provide capital and employment to local communities through the production of basic chemical components of common household and industrial products.

Without such industries, our lives would be devoid of many necessities and comforts that we take for granted.

Given the importance of the chemical industry, there is a need to expand the knowledge and understanding of how to build and operate a chemical manufacturing facility safely and economically to benefit society as a whole.

Keywords: Azeotropic distillation, Production of vinyl acetate monomer, Dynamic and steady-state analysis.

I. INTRODUCCIÓN

La complejidad de los procesos químicos proporciona un campo de estudio único [1] y los operadores de tales industrias se enfrentan al desafío de cumplir varios objetivos clave.

En primer lugar, el requisito de todo fabricante de productos químicos es operar su proceso de manera segura con un impacto mínimo en el medio ambiente [2]. La viabilidad económica es de suma importancia y está condicionada por estos requisitos de seguridad y medioambientales impuestos. El retorno de la inversión es fundamental para decidir si se construye una nueva instalación desde cero o si se mantiene en funcionamiento una instalación existente.

Una de las claves para la supervivencia económica de un proceso químico es basar el diseño en un conjunto bien establecido de objetivos del sistema de control [3].

A partir de estos objetivos, se debe seleccionar un conjunto de variables controladas para mantener la operación lo más cerca posible del rendimiento óptimo en estado estacionario después de que los transitorios causados por perturbaciones o cambios en los parámetros operativos hayan disminuido.

Para desarrollar mejor un diseño que satisfaga estas necesidades, se requiere un esfuerzo conjunto que involucre tanto a ingenieros como a ingenieros de control [3].

Sin tal colaboración, el diseño del proceso podría ser demasiado difícil de controlar o tener un sistema de control que es demasiado complejo para los requisitos necesarios del proceso. Un equilibrio entre los problemas de diseño y operatividad es una consideración crucial en el éxito de un proceso químico.

Otro componente crítico en el funcionamiento exitoso de un proceso químico es el desarrollo de la comprensión del proceso [3]. A través de la comprensión de la dinámica y las interacciones del proceso, se puede obtener una imagen más clara de la capacidad de control de la planta.

Es importante que los operadores de plantas químicas analicen los datos operativos para mantener y mejorar su comprensión de cómo funciona realmente la planta.

La investigación actual se está desarrollando rápidamente en el área de diseño, operación y control de toda la planta, ya que se identifica como un área importante para mejorar el rendimiento de los procesos existentes o de base [3].

Los beneficios de estos estudios incluyen una mejor comprensión de la dinámica y la respuesta del proceso, la identificación de cuellos de botella [4] y la identificación del

comportamiento no lineal, cada uno de los cuales conduce potencialmente a una simplificación en el diseño y la configuración del control.

Sin realizar un estudio dinámico de toda la planta, es difícil para el ingeniero comprender completamente el comportamiento complejo del diseño de toda la planta, lo que posiblemente conduzca a un sistema de control subóptimo del sistema de proceso y seguridad [5].

Este análisis es un elemento clave que los fabricantes deben utilizar para lograr sus objetivos de optimizar el comportamiento dinámico y el rendimiento de la configuración de control general de toda la planta.

Como primer paso en la optimización de la configuración de control, la plataforma de control base (DCS, transmisores, sensores, elementos de control final y red de comunicación) debe evaluarse y reconfigurarse o actualizarse para proporcionar el rendimiento más preciso y robusto [6].

Se pueden lograr mejoras significativas solo con esta actualización de control base con estimaciones que representan hasta el 15% de los beneficios (Marlin et al., 1987) para una actualización de control.

Un método adicional eficaz para satisfacer las demandas operativas actuales es el uso del Control Avanzado de Procesos (APC). En los últimos 20 años, las técnicas de APC han desempeñado un papel importante en la obtención de beneficios económicos al reducir los costos y aumentar la calidad del producto.

Estos tipos de control van desde esquemas de control relativamente simples y en cascada hasta técnicas de control predictivo de modelos (MPC) e inteligencia artificial más complejas [7].

Se estima que hasta el 60% de los beneficios de las mejoras de control pueden derivarse de APC cuando se implementan como una extensión de una actualización de control regulatorio base [8].

Además, los estudios de casos específicos han demostrado que se pueden lograr ahorros del 2 al 6% en los costos operativos anuales y un aumento del 1% en los ingresos [9].

Como resultado, existe un incentivo significativo para que los fabricantes implementen proyectos de control avanzados (junto con una actualización del hardware y software del sistema de control) para ayudar a mejorar su economía en el mercado.

Una herramienta clave que ayuda en el estudio de la capacidad de control en toda la planta es el uso de la simulación dinámica para modelar rigurosamente el comportamiento físico del proceso químico [10].

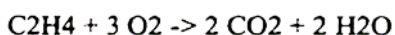
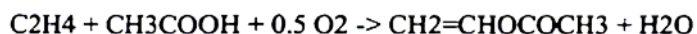
Con los avances en la velocidad computacional de las computadoras y el desarrollo de software, muchas de las barreras tradicionales para su uso ahora se minimizan [11].

Mediante el uso de estas rigurosas herramientas de modelado basadas en primeros principios, se pueden abordar estudios completos del comportamiento dinámico y las implicaciones de control en un entorno virtual.

Como resultado, se minimizan o evitan los impactos en los procesos reales, lo que permite probar desviaciones extremas de los parámetros operativos normales. La literatura tiene muchas buenas revisiones de los beneficios del uso de la simulación dinámica [12].

Un proceso particular que podría beneficiarse de los estudios de controlabilidad en toda la planta y el uso de tecnologías APC es el proceso de monómero de acetato de vinilo (VAM).

La producción de VAM se lleva a cabo predominantemente mediante la reacción catalítica en fase gaseosa del etileno con ácido y oxígeno. También se produce una segunda cara que produce subproductos adicionales. Estas reacciones clave se dan de la siguiente manera:



Este proceso juega un papel importante en la vida cotidiana, ya que proporciona la materia prima para productos comunes en uso, como adhesivos, textiles y pinturas hechos de acetato de polivinilo, así como en calzado y cableado hechos de acetato de etileno vinilo.

La demanda de materias primas es fuerte, y las últimas proyecciones muestran un crecimiento del 3,2% anual hasta el año 2010 para satisfacer las necesidades de las industrias de fibras y plásticos [13].

A pesar del fuerte crecimiento de la demanda del producto, los fabricantes están bajo presión para producir de la manera más eficiente posible debido al alto costo de las materias primas de ácido acético y etileno, lo que reduce los márgenes que se obtienen de la alta demanda [14].

Como resultado, no se esperan nuevas inversiones en plantas de base a corto y mediano plazo y el enfoque en la eliminación de cuellos de botella y las mejoras operativas dominarán el mandato de ingeniería [14].

Por lo tanto, existe un incentivo significativo para que las instalaciones de producción de VAM implementen un control en toda la planta para ayudar a satisfacer esta demanda de eficiencia y una instalación de procesamiento bien controlada.

Una limitación para comprender adecuadamente el comportamiento del proceso VAM es la falta de información detallada del proceso y el diseño de la instalación de producción. Para ayudar a los investigadores y profesionales industriales a comprender mejor los impactos de las actualizaciones de control en el proceso de acetato de vinilo, existe la necesidad de información detallada sobre el diseño del proceso en la literatura abierta.

Para satisfacer esta necesidad, Luyben & Tyreus (1998) presentaron detalles de un diseño industrial propuesto para un proceso VAM, dando a la comunidad investigadora un gran proceso químico integrado para estudiar.

Su trabajo incluyó el balance general de masa y energía, además de una estrategia de control regulatorio propuesta.

TMODS, el simulador dinámico interno de Dupont, se utilizó para ilustrar la efectividad de su esquema de control propuesto para cumplir con los requisitos de control definidos y los objetivos del proceso. Su trabajo proporciona la base para esta investigación dada la falta de datos en la literatura abierta.

II. ESTRATEGIA METODOLÓGICA

2.1. Diseño de procesos y configuración de control base de toda la planta

Como se discutió en el Capítulo I, el monómero de acetato de vinilo (VAM) se usa ampliamente en la producción de artículos domésticos e industriales comunes. Debido a la naturaleza patentada de los productores industriales de VAM, hay muy poca información operativa y de diseño disponible en la literatura abierta para facilitar un estudio dinámico.

Para satisfacer la necesidad de información detallada sobre el diseño del proceso, Luyben y Tyreus (1998) [15] propusieron un diseño industrial para el proceso VAM que brinda a la comunidad investigadora un proceso químico integrado para estudiar.

Se presenta una descripción general de su diseño, comenzando con una discusión de la cinética de reacción seguida de una ilustración esquemática de la planta junto con la clasificación de operación de la unidad clave y los parámetros nominales del proceso.

Además, se presentan los objetivos generales de control seguidos de una descripción de la estrategia de control propuesta en toda la planta dada en Luyben et al., (1999) [15]. Esta estrategia de control se utilizará como el rendimiento del caso base con el que se harán comparaciones de estrategias alternativas.

2.1.1. Cinética de reacción

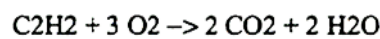
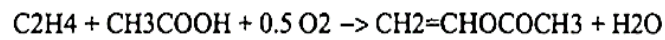
El proceso de monómero de acetato de vinilo implica la reacción catalizada en fase gaseosa de etileno, ácido acético y oxígeno. Un catalizador de metales preciosos como el paladio metálico o mezclas de metales nobles o aleaciones de los metales se utilizan comúnmente [9].

La alúmina o la sílice se pueden utilizar como soporte impregnado con el catalizador de metales preciosos y contenido en tubos largos de un reactor de lecho empaquetado para proporcionar la activación necesaria para la reacción. La selectividad de la reacción es muy buena con valores de la literatura que oscilan entre el 91 y el 94% [9].

Esta selectividad principal del producto se ve afectada por la producción de subproductos como una pequeña cantidad de acetato de etilo y una mayor cantidad de CO₂.

Para los propósitos de este estudio y como se indica en Luyben y Tyreus, (1998) [16], solo se considera la reacción del subproducto para la producción de CO₂ en el desarrollo y modelado de la reacción porque la formación de acetato de etilo es pequeña [9].

Las reacciones químicas básicas que tienen lugar se dan de la siguiente manera:



Estas reacciones son altamente exotérmicas y requieren un control estricto de la temperatura del reactor de lecho empaquetado en fase gaseosa. Ambos han sido estudiados extensamente [17].

Luyben y Tyreus (1998) [16] han tomado los datos del espacio-tiempo de Samanos et al., (1971) [18] y han producido las siguientes expresiones de velocidad complejas:

$$R_1 = \frac{0.1036 \cdot \exp\left(-\frac{3674}{T}\right) \cdot p_o \cdot p_e \cdot p_a \cdot (1 + 1.7p_w)}{(1 + 0.583p_o(1 + 1.7p_w)) \cdot (1 + 6.8p_a)}$$

$$R_2 = \frac{1.9365 \times 10^5 \cdot \exp\left(-\frac{10116}{T}\right) \cdot p_o \cdot (1 + 0.68p_w)}{(1 + 0.76p_o(1 + 0.68p_w))}$$

Aquí, R₁ y R₂ son las velocidades de reacción de las ecuaciones en moles VAM producidos/min/g de catalizador y moles de etileno consumidos/min./g de catalizador, respectivamente.

La temperatura T está en kelvin y p_o, p_e, p_a y p_w son las presiones parciales de oxígeno, etileno, ácido acético y agua en psia. Estas expresiones de tasa cinética se han implementado en un modelo dinámico de toda la planta para garantizar la precisión en el rendimiento y la conversión en comparación con el diseño base en las referencias de datos originales [16].

2.1.2. Descripción del proceso

El diseño de proceso utilizado en este estudio se centra en las unidades centrales de producción y excluye las etapas de almacenamiento de alimentos y purificación del producto.

Para proporcionar una visión general del diseño del proceso, la Figura 1 muestra un diagrama de flujo de bloques que destaca las principales secciones del proceso y el reciclaje.

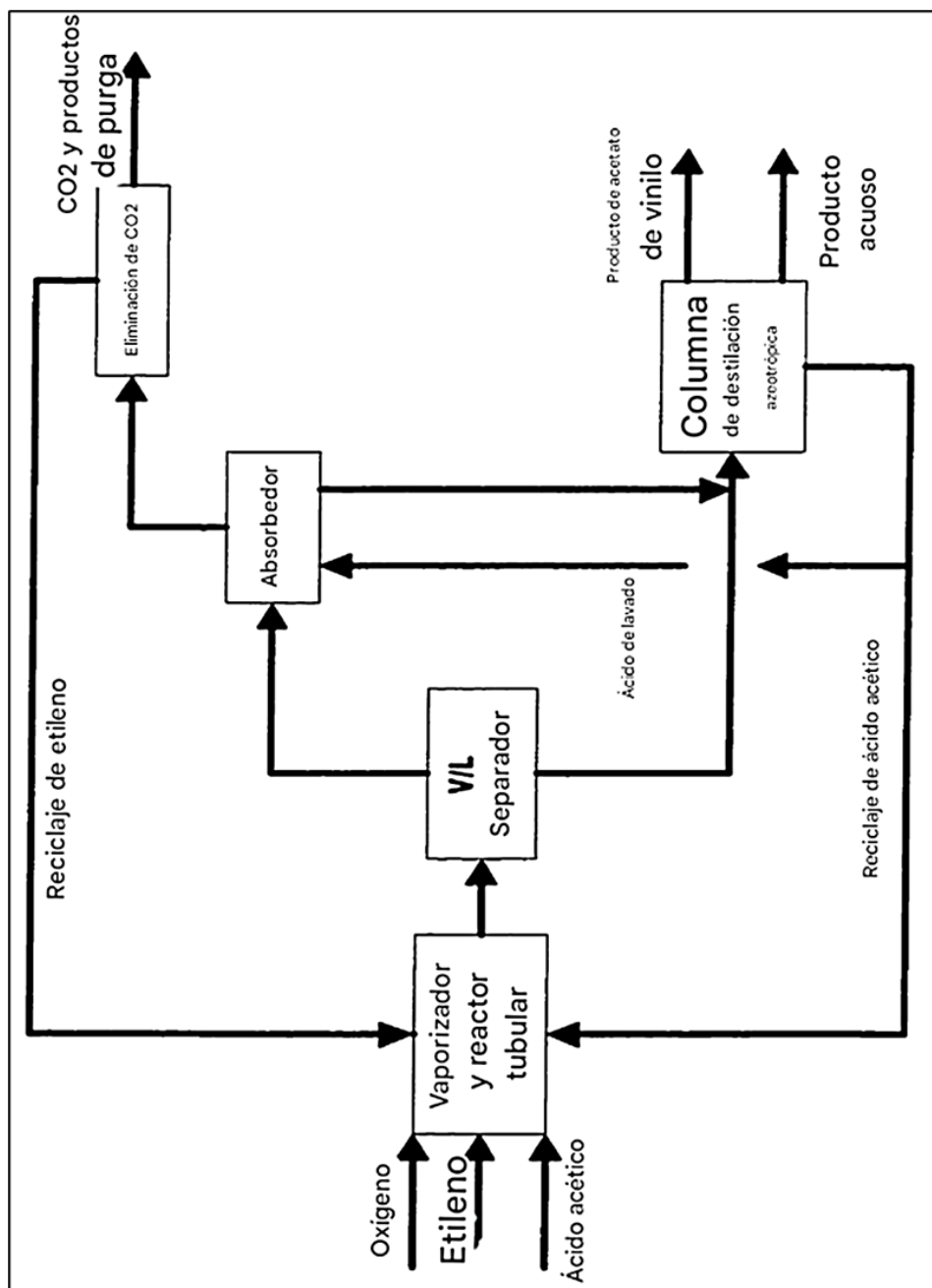


Fig. 1 Diagrama de flujo de bloques para el diseño del proceso de monómero de acetato de vinilo

La Figura 2 proporciona el esquema completo del diagrama de flujo del proceso que muestra las operaciones de la unidad individual, las líneas de flujo y las válvulas de control.

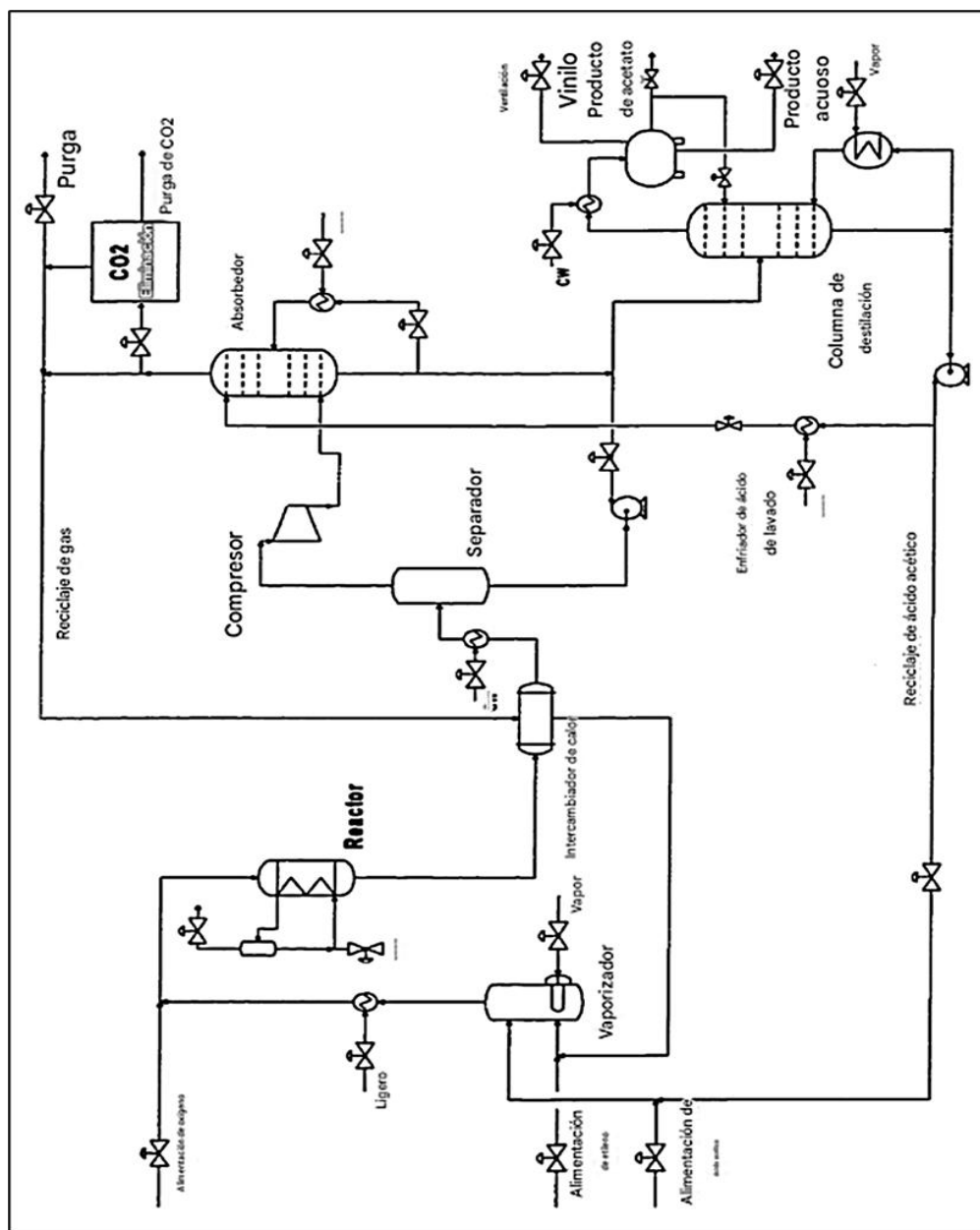


Fig. 2 Diagrama de flujo del diseño del proceso de monómero de acetato de vinilo

Tener en cuenta que hay 26 grados de libertad en el diseño del proceso, cada uno representado por las válvulas que se dan en el diagrama. Para maximizar la conversión, el flujo de reciclaje de gas debe mantenerse en un valor lo más alto posible [20].

Para hacer esto, las válvulas en las corrientes de salida de gas del vaporizador, separador y absorbedor se dejan completamente abiertas o se retiran por completo para ahorrar el costo de la válvula [15].

Además, para simplificar el esquema de control del reactor, solo se aplicó una sola corriente de servicio, eliminando efectivamente la necesidad de la válvula de control de presión. Estos reducen los grados de libertad de control a 22 para toda la planta.

Como se puede ver en las Figuras 1 y 2, hay 7 equipos principales: un vaporizador, un reactor de lecho empaquetado en fase gaseosa, un intercambiador de calor, un separador de líquido de vapor, un compresor, una columna absorbidora y una columna de destilación azeotrópica.

También son de particular interés los bucles de reciclaje de gas y líquido con un bucle secundario de reciclaje de líquido a la columna absorbidora. El propósito del ácido de lavado es eliminar el VAM, el agua y el ácido acético que se han trasladado a la corriente de reciclaje de gas que sale del separador de vapor/líquido.

Es fundamental tanto desde el punto de vista económico como operativo que las pérdidas de estos componentes se minimicen a través de este proceso de absorción.

El vapor de cabeza de la columna de destilación azeotrópica consiste en una mezcla de VAM/agua con una pequeña cantidad de ácido acético y componentes no condensables.

Esta corriente de vapor se enfría a 40 C donde una mezcla inmiscible entre una fase dominante de agua y una fase dominante de VAM se enfría. Se utiliza una operación de decantador separada para proporcionar la división entre las dos fases líquidas.

La fase acuosa se envía para su posterior tratamiento para cumplir con las restricciones ambientales, mientras que el flujo de productos VAM se refina en otras unidades de procesamiento posteriores.

En la Tabla 1 se enumeran varios de los parámetros operativos clave para cada unidad. Asimismo, la Tabla 2 incluye algunos de los datos clave de los equipos para las operaciones de la unidad.

Tabla 1 Parámetros operativos clave de la unidad de proceso

Operación unitaria	Parámetro	Valor
Vaporizador	Temperatura de salida	118,2°C
Reactor de lecho empaquetado	Temperatura de entrada	147,4°C
	Temperatura de salida	158,9°C
Separador de vapor/líquido	Temperatura de salida	35,5°C
Compresor	Relación de compresión	1.8
	Temperatura de salida	80,2°C
Intercambiador de calor	Temperatura de entrada del lado frío	39,7°C
	Temperatura de salida del lado frío	87,0°C
	Temperatura de entrada del lado caliente	158,9°C
	Temperatura de salida del lado caliente	126,9°C
Absorbedor	Temperatura superior	39,7°C
	% molar CO ₂ en Top Stream	1.1
	% molar de ácido acético en Top Stream	0.1
	% molar VAM en Top Stream	0.2
	Temperatura de los fondos	53,2°C
	% molar CO ₂ en Bottoms Stream	0.03
Columna de destilación azeotrópica	% molar A. Ácido en Bottoms Stream	58.9
	% molar VAM en Bottoms Stream	26.1
	Temperatura superior	82,8°C
	Temperatura de los fondos	136,5°C
	% molar A. Ácido en Bottoms Stream	90.7
	% molar VAM en Bottoms Stream	1 ppm
	% molar de agua en Bottoms Stream	9.3

Tabla 2 Información clave de clasificación de unidades de proceso

Operación de la unidad	Parámetro	Valor
Vaporizador	Volumen, m ³	17.0
	Nivel, %	49.9
Reactor	Volumen total de reacción, m ³	6.1
	Densidad aparente del catalizador, kg/	500.0
Separador de vapor/líquido	Volumen, m ³	15.0
	Nivel, %	50.2
Intercambiador de calor	UA general, kJ/C-hr	2.85e4
Absorbedor	Etapas ideales	8
	Volumen de líquido de la etapa, m ³	- 0.30
	Bomba alrededor del flujo, m ³ /h real	55.5
	Volumen del sumidero, m ³	8.0
	Nivel del sumidero, m ³	49.5
Columna azeotrópica	Destilación Etapas ideales	21

	Volumen de líquido de la etapa, m3	- 0.17
	Volumen del decantador, m3	10.0
	Nivel de decantador, %	50.0
	Volumen del hervidor, m3	12.0
	Nivel de rehervidor, %	43.2

2.1.3. Objetivos generales de control

Para establecer una base para comprender la capacidad de control del proceso VAM, se debe derivar una declaración clara de los objetivos generales de control. A partir de esta comprensión, se pueden sentar las bases para establecer requisitos de control más específicos y utilizarlos de manera efectiva para probar el rendimiento de la base y las estrategias de control propuestas. Los objetivos generales de la planta son los siguientes:

- Producir VAM de forma segura y económica.
- Minimizar el impacto ambiental.
- Maximizar el rendimiento de VAM.
- Minimizar las pérdidas de materias primas.
- Controlar los inventarios de productos químicos.
- Minimizar los costos operativos.

Es evidente que estos objetivos generales son bastante genéricos y pueden aplicarse a la mayoría de las instalaciones de producción. Sin embargo, sientan las bases para la derivación de un conjunto más refinado de objetivos apropiados para el proceso VAM.

Afortunadamente, el paso 1 del procedimiento de Luyben et al. (1999) [15] definió los objetivos clave para la planta. Estos objetivos se enumeran a continuación para facilitar la comprensión del enfoque utilizado en los diseños de control de toda la planta que se ilustran en este y en capítulos posteriores. Estos objetivos de control específicos son:

- Poder ajustar la producción de VAM minimizando las pérdidas de rendimiento por la producción de dióxido de carbono.
- La concentración de oxígeno en el circuito de recirculación de gas debe mantenerse fuera del rango de explosividad del etileno.

- El absorbedor debe recuperar la mayor cantidad posible de VAM, agua y ácido acético del circuito de recirculación de gas para evitar pérdidas en el sistema de eliminación de CO₂.
- Minimizar las pérdidas de ácido acético en la parte superior de la columna de destilación azeotrópica.
- Minimizar la concentración de VAM en la corriente de fondo de la columna de destilación azeotrópica a menos de 100 ppm.
- Garantizar el control durante la parada de producción.

Para este estudio, nos hemos centrado en los tres últimos objetivos mencionados, ya que afectan directamente a la columna de destilación azeotrópica. Se ha asumido que los demás objetivos se gestionan mediante la estrategia de control general de la planta, si bien cabe señalar que, dada la complejidad del proceso, podría no ser posible alcanzarlos todos.

2.1.4. Diseño de la estrategia de control base de toda la planta

La estrategia de control de procesos para el diseño VAM propuesta y probada por Luyben et al. (1999) [15] se ha utilizado para establecer un nivel base para el rendimiento del control de toda la planta.

Estos autores basan su estrategia de control en su propio procedimiento de diseño de control de planta, que consta de un procedimiento bien definido de 9 pasos.

Los detalles de este procedimiento no se tratarán aquí; para obtener más información, se remite al lector a la referencia original (Luyben et al., 1999) [15].

Sin embargo, el diseño descentralizado propuesto se muestra en detalle en la Figura 3, donde se ilustra la selección de pares entre las válvulas de control y las variables controladas (Tabla 3).

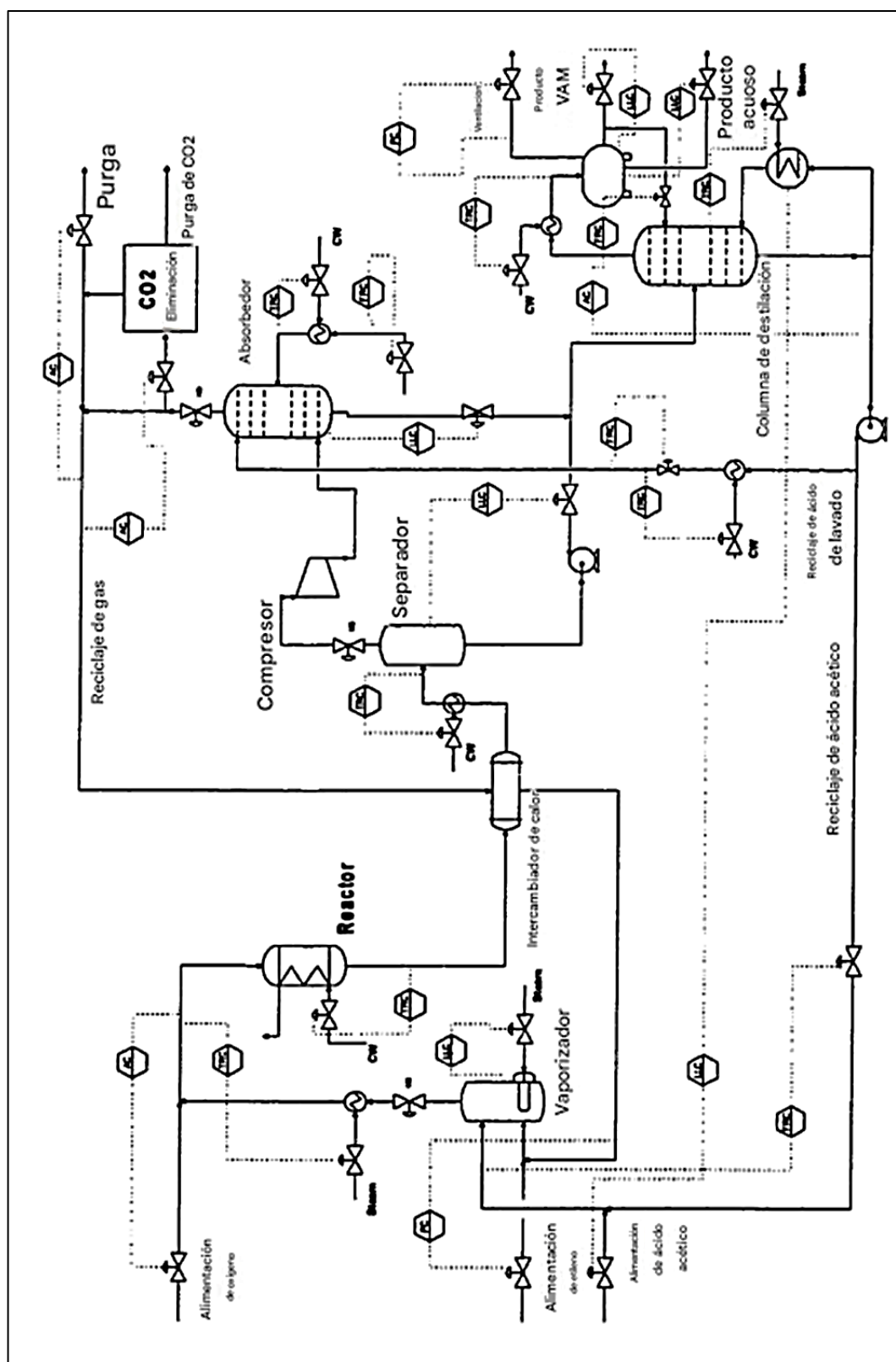


Fig. 3 Estrategia básica de control para toda la planta

Tabla 3 Emparejamientos de variables controladas y manipuladas

Variable controlada	Variable manipulada
Concentración de oxígeno en la alimentación del reactor	Flujo de alimentación de oxígeno
Temperatura de alimentación del reactor	Servicio del calentador de molduras
Temperatura de salida del reactor	Servicio de enfriamiento del reactor
Temperatura de alimentación del separador	Servicio del enfriador del separador
Nivel de separador	Flujo de líquido separador
Nivel de sumidero del absorbedor	Flujo de líquido del sumidero
Bomba de absorción alrededor del flujo	Bomba de absorción alrededor del flujo
Bomba de absorción alrededor de la temperatura	Enfriador de absorción de servicio
Concentración de etano en el reciclaje de gas	Flujo de purga
Concentración de CO ₂ en el reciclaje de gas	Flujo de alimentación de extracción de CO ₂
Presión de reciclaje de gas	Caudal de alimentación de etileno
Temperatura del decantador	Servicio del condensador
Presión de la columna de destilación azeotrópica	Flujo de ventilación del decantador
Nivel de capa VAM del decantador	Flujo de productos VAM
Nivel de capa acuosa del decantador	Flujo de productos acuosos
Temperatura de la etapa	Servicio de rehervidor
Composición del agua Arroyo de fondos	Flujo de reflujo
Flujo ácido de lavado	Flujo ácido de lavado
Temperatura del ácido del lavado	Lavar el enfriador de ácido
Nivel de rehervidor	Flujo de alimentación de ácido acético
Flujo total de alimentación de ácido acético al vaporizador	Flujo de reciclaje de ácido acético
Nivel del vaporizador	Servicio de vaporizador

Tres conjuntos de bucles de control son de particular interés y vale la pena señalarlos. El primero es el control de nivel del nivel del hervidor de la columna de destilación azeotrópica con flujo de alimentación de ácido acético.

La justificación para usar este emparejamiento se basa en el razonamiento de que el nivel del hervidor es una indicación del inventario de ácido acético en el proceso y un buen emparejamiento con el flujo de alimentación de ácido acético.

Como resultado de esta selección de emparejamiento, el nivel de vaporizador debe controlarse con el flujo de vapor a través de la velocidad de vaporización. Un

segundo conjunto de bucles que vale la pena señalar son los 2 bucles de composición de la columna de destilación azeotrópica.

Desde el punto de vista del objetivo de control práctico, los dos componentes clave a controlar son el VAM en la corriente inferior y el ácido acético en el producto superior.

Es fundamental garantizar que el VAM en el reciclaje de ácido acético inferior se mantenga por debajo de 100 ppm, ya que el VAM tiende a polimerizarse en las operaciones de la unidad aguas arriba a través del reciclaje de líquidos, lo que provoca dificultades operativas y, en casos extremos, se apaga.

Las pérdidas de ácido acético en el flujo de productos deben minimizarse para mantener bajos los costos operativos. Sin embargo, en el análisis de control de procesos de toda la planta de Luyben et al., (1999) [15] se determinó que el balance de masa del componente H₂O no estaba siendo regulado.

En consecuencia, se adoptó el control de la composición del H₂O en la corriente de fondo en lugar de un controlador de ácido acético en la parte superior de la columna. Debido a la rápida dinámica del vapor que se evapora del rehervidor, la carga térmica del rehervidor se ajustó a la composición de VAM en la corriente de fondo.

Sin embargo, para obtener una respuesta de medición rápida, la composición de VAM se infirió utilizando la temperatura de los platos. Finalmente, la composición del H₂O se ajustó al flujo de reflujo para proporcionar el control necesario para regular el inventario de H₂O.

A continuación, se presenta un resumen de los ajustes:

y1 (variable de control) = composición de H₂O en los fondos de la columna de destilación azeotrópica.

u1 (variable manipulada) = Caudal másico de reflujo.

y2 (variable de control) = Temperatura de la etapa azeotrópica para inferir la composición VAM en los fondos de la columna de destilación azeotrópica.

u2 (variable de control) = Ciclo de trabajo del rehervidor.

El tercer conjunto de bucles de interés es para la temperatura de salida del reactor de lecho empacado y el control de concentración de oxígeno en la alimentación al reactor. Debido a las estrictas restricciones de seguridad para el oxígeno en el

circuito de gas, se ha excluido el uso del flujo de alimentación de oxígeno como método para establecer la tasa de producción.

Como resultado, la temperatura de salida del reactor se utiliza para controlar la tasa de producción dado que la cinética del reactor es directamente proporcional a la temperatura.

Los bucles de control restantes se utilizan para regular la capacidad del proceso, los inventarios químicos y la gestión de la energía. Cada bucle contiene el controlador proporcional convencional o integral proporcional.

Esta estrategia de control para toda la planta propuesta representa el caso base que se utilizará en la comparación con estrategias alternativas.

III. RESULTADOS

3.1. Desarrollo de modelos

Los resultados de este estudio se derivan del uso de una rigurosa simulación dinámica basada en primeros principios.

Las reacciones cinéticas, la termodinámica de equilibrio de fase, los cálculos personalizados de control y las operaciones de la unidad de proceso se desarrollan dentro de productos de software disponibles en el mercado.

Este enfoque ha permitido el desarrollo rápido de una simulación dinámica detallada y completa en toda la planta.

3.2. Desarrollo de modelos termodinámicos

Uno de los aspectos clave en la simulación del proceso de monómero de acetato de vinilo (VAM) es el desarrollo de un modelo termodinámico apropiado para representar mejor el comportamiento complejo de equilibrio vapor-líquido-líquido no ideal (VLLE).

En este estudio se evaluaron varios modelos de coeficientes de actividad como NRTL (Non-Random Two Liquid) [21], UNIQUAC (Universal Quasi Chemical) [22], Van Laar [23] y Wilson [24] por su capacidad para modelar la mezcla ternaria VAM/agua/Ácido acético.

Los parámetros de cada modelo se ajustaron utilizando los datos disponibles y se compararon en función de la consistencia y composición de la fase en relación con los datos proporcionados por Luyben y Tyreus (1998) [16].

El modelo termodinámico que mejor se ajustaba al comportamiento YCLE dado en Luyben y Tyreus (1998) [16] fue la ecuación UNIQUAC [22].

Esta ecuación es la base para establecer el equilibrio general de fase, ya que proporciona coeficientes de actividad en fase líquida que explican el comportamiento líquido no ideal.

$$\ln \gamma_i = \ln \left(\frac{\Phi_i}{x_i} \right) + 0.5 Z q_i \ln \left(\frac{\theta_i}{\Phi_i} \right) + L_i - \left(\frac{\Phi_i}{x_i} \right) \sum_{j=1}^m x_j L_j$$

$$+ q_i \left(1.0 - \ln \sum_{j=1}^m \theta_j \tau_{ji} \right) - q_i \sum_{j=1}^m \left(\frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_{k=1}^m \theta_k \tau_{kj}} \right)$$

Dónde:

γ_i = Coeficiente de actividad del componente i.

x_i = Fracción molar del componente i.

T = Temperatura, K.

n = Número total de componentes.

$$L_i = 0.5 Z (r_i q_i - r_i + 1).$$

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_{j=1}^m q_j x_j}$$

$$\Phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_{j=1}^m r_j x_j}$$

$$\tau_{ij} = \exp \left(- \frac{(a_{ij} + b_{ij} T)}{RT} \right)$$

z = 10.0 (Número de coordinación).

a_{ij} = Parámetro energético binario independiente de la temperatura (cal/gmol)

b_{ij} = Parámetro energético binario dependiente de la temperatura (cal/gmol).

q_i = parámetro de área de van der Waals.

r_i = parámetro de volumen de van der Waals.

Para este estudio solo se utilizaron los parámetros binarios independientes de la temperatura (a_{ij}).

El método de estimación UNIFAC LLE [25] disponible en el entorno de base termodinámica (HYSYS. Plant Simulation Basis, 1998) [26], se utilizó para derivar los parámetros de interacción binaria VAM/Agua debido a la falta de datos experimentales de LLE de calidad para estos dos componentes.

Los parámetros de interacción restantes se tomaron de los datos de baja presión dados en la serie de datos DECHEMA [26].

Todas las fugacidades en fase líquida de componentes no condensables se derivaron utilizando los coeficientes predeterminados de la Ley de Henry de HYSYS con la excepción del etano.

Superar una pequeña discrepancia en los datos del proceso del diseño original del proceso [16].

Específicamente, se demostró que la alimentación a la columna de destilación azeotrópica dada en la referencia no contiene etano a pesar de la clara presencia de etano (documentada en la misma referencia) en el líquido que sale del absorbedor y entra en la columna de destilación azeotrópica. Se tomó la decisión de asumir que no entraría etano en la columna con la corriente de alimentación líquida.

Por lo tanto, para reducir la solubilidad del etano en la fase líquida, se estimaron los coeficientes de Henry de etano/VAM y etano/ácido acético iguales a los de etano/agua, según la base de datos termodinámica del simulador.

Este enfoque permitió un mejor ajuste del balance y la concentración de etano en el recirculado de gas, evitando la eliminación completa del etano del sistema.

A pesar de la baja presión a la que opera la columna de destilación azeotrópica (y, por lo tanto, podría decirse que impide el efecto de la asociación de componentes en la fase de vapor), se encontró que el modelo de fugacidad de vapor virial era el más preciso.

Los parámetros de interacción binaria predeterminados de ácido acético/agua de UNIQUAC predicen un azeótropo falso cuando se eligió el modelo de fase de vapor ideal.

Se encontró que esta mala predicción se manifestaba en una concentración de ácido acético moderadamente más alta calculada en los sistemas orgánicos y acuosos del producto.

Sin embargo, debido a la complejidad de la segunda estimación del coeficiente virial [27], el tiempo de simulación dinámica fue muy prolongado para las pruebas típicas: 200 minutos frente a los 40 minutos del modelo termodinámico ideal en una estación de trabajo PII de 500 MHz.

Por lo tanto, se decidió quedarse con el supuesto de gas ideal para mantener la velocidad de simulación adecuada requerida para facilitar este estudio. Con esta suposición, la constante de equilibrio se simplifica a la siguiente expresión:

$$K_i = \frac{\gamma_i P^{sat}_i}{P}$$

K_i = Constante de equilibrio para el componente

γ_i = Coeficiente de actividad del componente i.

P^{sat}_i = Presión de saturación del componente i (kPa).

P = Presión total del sistema (kPa)

Los cálculos de equilibrio de fases se realizan de manera directa utilizando esta ecuación. Se remite al lector a otras referencias para obtener detalles sobre cómo resolver estos cálculos de equilibrio de fases [28].

3.3. Desarrollo de modelos matemáticos

El modelo de toda la planta utilizado en este estudio se implementó utilizando el primer simulador dinámico basado en principios *HYSYSTM* de Hyprotech Ltd.

Este simulador utiliza ecuaciones fundamentales de balance de masa y energía predefinidas para cada operación unitaria, así como un riguroso modelo de retención para aquellas operaciones que tienen un plazo de acumulación.

La solución de estos balances de materiales, energía y componentes no se considera al mismo tiempo, ya que se emplea una estrategia de integración especial para proporcionar una solución rápida y robusta en cada paso del tiempo de integración.

Los detalles de las ecuaciones básicas de conservación y el modelo de retención para la columna de destilación y el reactor de lecho empaquetado están disponibles en el manual del usuario [29], sin embargo, las características esenciales se presentan aquí como material de referencia.

Además, se presenta la estrategia de integración para ilustrar las diferentes interacciones del solucionador.

3.3.1. Ecuaciones de conservación y retención

Fundamental en el procedimiento de integración del paso de cálculo dinámico es la implementación de un modelo riguroso de retención para tener en cuenta la acumulación.

Estrechamente relacionados con la solución de este modelo están las relaciones básicas de conservación y física que definen rigurosamente el comportamiento dinámico y de estado estacionario de cada elemento del equipo de proceso.

Las relaciones de conservación son las mismas que se utilizaron en estado estacionario, sin embargo, incluyen el término de acumulación definido con respecto a varios tipos diferentes de operaciones unitarias que se utilizan en este modelo de simulación de toda la planta que utilizan el modelo de retención.

Como ejemplos, a continuación, se presentan los detalles del modelo de conservación y retención para el reactor de flujo de pistón de lecho empaquetado y la columna de destilación.

3.3.1.1. Modelado de columnas de destilación

La columna de destilación se resuelve de forma distribuida resolviendo una serie de modelos de parámetros agrupados representados por etapas de separación. La Figura 4 muestra una etapa de columna alimentada y flujos de producto asumiendo que no hay reacción.

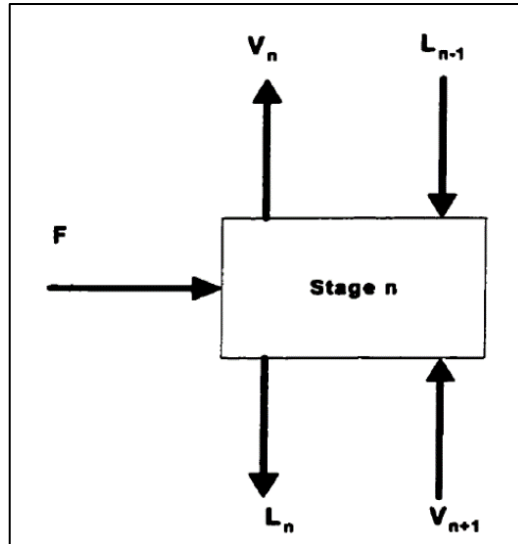


Fig. 4 Modelo de etapas de columna de destilación

Los balances diferenciales generales de materiales y componentes son:

$$\frac{dM_n}{dt} = F + L_{n-1} + V_{n+1} - L_n - V_n$$

$$\frac{dM_n^L x_i}{dt} = F^L z_i + L_{n-1} x_{i,n-1} - L_n x_{i,n}$$

$$\frac{dM_n^V y_i}{dt} = F^V z_i + V_{n+1} y_{i,n+1} - V_n y_{i,n}$$

Dónde:

M_n = Total de moles de material en la bandeja n.

M_n^L = Total de moles de líquido en la bandeja n.

M_n^V = Total de moles de vapor en la bandeja n.

x_i = Fracción molar líquida del componente i.

y_i = Fracción de vapor del componente i.

z_i = Fracción molar de alimentación del componente i.

F = Total de moles de alimento a la bandeja n.

V = Moles de vapor que entran o salen de la bandeja n.

L = Moles de líquido que entran o salen de la bandeja n.

La energía para la bandeja n se calcula de la siguiente manera:

$$\frac{d(M_n^l h l_n + M_n^v h v_n)}{dt} = F h f + L_{n-1} h l_{n-1} + V_{n+1} h v_{n+1} - L_n h l_n - V_n h v_n$$

Dónde:

h = entalpía molar específica (J/mol).

Se pueden encontrar más detalles sobre el modelado de columnas de destilación en el manual de *HYSYSTM* [29] y también en la literatura abierta [15].

3.3.1.2. Modelado de reactores de flujo de pistón de lecho fijo

El reactor de flujo de pistón de lecho empaquetado también representa un modelo distribuido que varía espacialmente hacia el eje del tubo, así como en el tiempo. Para tener en cuenta estos dos requisitos de integración, el reactor se divide en secciones de igual longitud.

Se supone que cada sección tiene uniformidad espacial en todas las propiedades similar a un reactor de tanque de agitación continua (CSTR).

Las ecuaciones generales de balance de materiales, componentes y energía se derivan de manera similar a las ecuaciones de la etapa de destilación, pero incluyen un término de generación debido a la reacción y tienen solo un flujo de alimentación y producto. Para la reacción en fase gaseosa de vapor, las ecuaciones se pueden escribir de la siguiente manera:

$$\frac{d(\rho_o V)}{dt} = F_i \rho_i - F_o \rho_o$$

$$\frac{dM_n^v y_i}{dt} = F_i z_i - F_o y_i + R_i V$$

$$\frac{d(M_n^v h v_n)}{dt} = F_i h_i - F_o h_o + Q + Qr$$

Dónde:

p = Densidad del arroyo (kg/m³).

V = Volumen de reacción de la sección n (m³).

F = Caudal volumétrico (m³/h).

- M_n^V = Molas totales de vapor en la sección n.
- Q = Calor agregado a través del límite del proceso (J/hr).
- Q_r = Calor generado por la reacción (J/h)
- R_i = Velocidad de reacción para el componente i (moles/h).
- i, o = Entrada y salida de la sección del reactor.

Se pueden encontrar más detalles sobre el modelado de reactores en el manual de *HYSYSTM* [29] y también en la literatura abierta [30].

Para tener en cuenta de manera efectiva el comportamiento dinámico del inventario de materiales acumulado dentro de cada equipo, se emplea un riguroso modelo de retención.

El objetivo de este modelo de retención es predecir con precisión el tiempo de respuesta del material contenido y las corrientes de salida a los cambios en las condiciones de alimentación y la carga de calor del recipiente.

En el modelo de retención se incluyen las relaciones fundamentales de conservación, termodinámica y reacción química, como las ecuaciones dadas anteriormente.

La Figura 5 presenta un esquema para mostrar las relaciones clave utilizadas en el modelo.

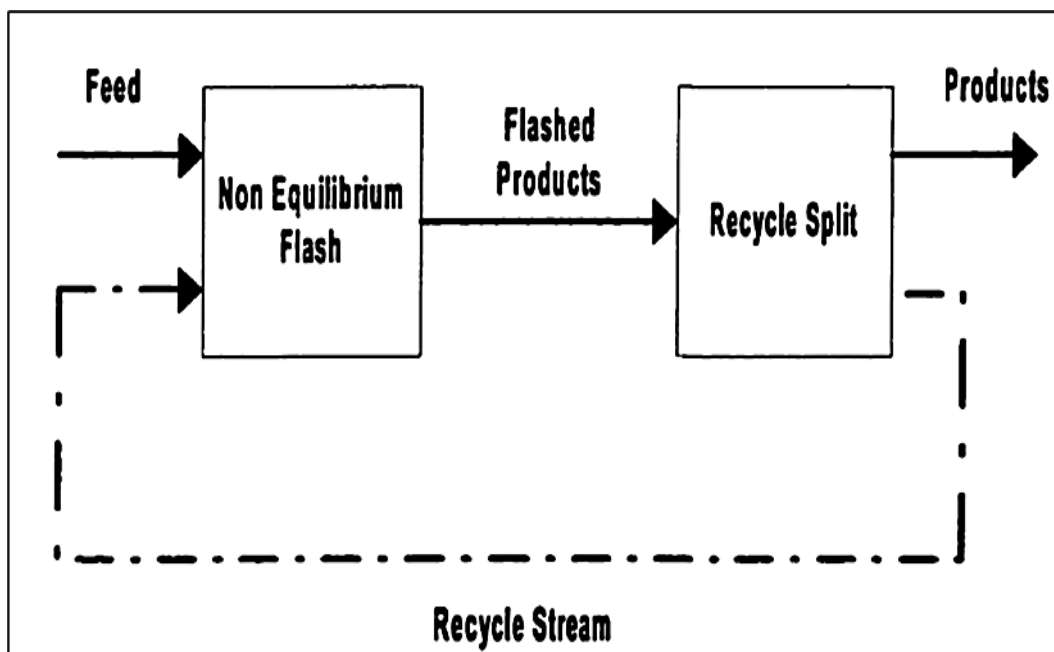


Fig. 5 Representación gráfica del modelo de retención

El primer paso en el cálculo es la acumulación de retención que se establece asumiendo un flujo de pseudo reciclaje. Esta corriente se calcula solo cuando se realiza un cálculo riguroso de flash termodinámico [28] y su valor de flujo se distribuye uniformemente a lo largo del número de pasos de tiempo especificados estableciendo la frecuencia de la actualización de la composición [29].

En segundo lugar, se utiliza un flash de no equilibrio para tener en cuenta la mezcla no ideal de los flujos de alimentación con la retención. Este cálculo emplea una potencia de flash que pasa por alto una cierta proporción de la alimentación alrededor del flash de equilibrio para producir el efecto de una mezcla no ideal.

Un tercer aspecto es la implementación de reacciones químicas que se aplican al volumen de acumulación del material.

Finalmente, otros cálculos manejados por el modelo de retención, pero no utilizados en este estudio, incluyen la pérdida de calor del equipo y las contribuciones de la carga estática.

Estos cálculos adicionales son necesarios para hacer coincidir la simulación con los datos operativos de la planta, pero no se han considerado aquí porque este estudio se basa en un diseño virtual, sin datos operativos de la planta.

3.3.2. Estrategia de integración

El modelo de retención contiene la mayoría de las ecuaciones fundamentales que definen cada operación unitaria simulada. Un aspecto importante de la resolución de las ecuaciones es la estrategia empleada en la secuenciación del procedimiento de integración.

Integrar todas las ecuaciones en cada paso sería demasiado costoso en términos de velocidad de simulación general, por lo que se ha empleado un enfoque novedoso para secuenciar el procedimiento.

En concreto, se integran los siguientes tipos de variables en diferentes momentos:

- Presiones y flujos.
- Entalpías.
- Composición.

Los balances de materiales (presión-flujo) se resuelven en cada paso mediante un solucionador simultáneo para obtener la red presión-flujo de todo el diagrama de flujo.

Los balances de energía y componentes se resuelven con menor frecuencia, con valores predeterminados de 2 y 10 pasos de integración, respectivamente.

Durante este periodo, se utiliza una aproximación local para las variables de energía y composición, ya que estas no tienden a cambiar tan rápidamente como las variables de presión y flujo.

El solucionador de balances de energía y componentes funciona de forma modular y secuencial para cada equipo, en lugar de hacerlo simultáneamente.

Es de particular importancia la solución de balances de presión-flujo para todo el diagrama de flujo. Este marco de ecuaciones particionadas contiene las ecuaciones funcionales que definen las relaciones presión-flujo divididas en dos áreas básicas: ecuaciones de resistencia y ecuaciones de balance de volumen.

Las ecuaciones de balance de volumen utilizan manifestaciones simples de las ecuaciones de continuidad general para el volumen de material contenido dentro de un recipiente.

Sin embargo, las ecuaciones de resistencia relacionan el flujo y la presión y son una función del tipo de flujo de material de operación unitaria. Para ilustrar una

ecuación de resistencia, se presenta a continuación una forma simplificada de la ecuación general de la válvula:

$$Flow = k\sqrt{\Delta P}$$

Dónde:

k = Conductancia, que representa el recíproco de la resistencia al flujo.

ΔP = caída de presión por fricción sin contribuciones de carga estática, (kPa).

Las diferentes formas de las ecuaciones de resistencia para los diversos equipos utilizados en este estudio se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4 Ecuaciones de resistencia para operaciones unitarias seleccionadas

Operaciones de la unidad	Término de resistencia
Válvula	Ecuación del método cv.
Bomba/Compresor	La relación presión-flujo se define por la energía y la eficiencia.
Calentador / Enfriador / Intercambiador de calor	Forma simplificada de la ecuación general de válvulas.
Placa de sección de bandeja de columna de destilación	1) Ecuación de Francis Weir para el flujo de líquido de la bandeja. 2) Forma simplificada de la válvula general Ecuación para el flujo de vapor a través de la placa.

3.4. Desarrollo del control ActiveXTM de reacción cinética

Se utilizó Visual Basic (VB) para proporcionar una implementación personalizada de la expresión cinética para proporcionar un cálculo preciso de la velocidad de reacción para la producción primaria de VAM y la reacción secundaria del subproducto de CO₂.

El procedimiento hace uso de las capacidades de automatización Microsoft ActiveX incorporadas en HYSYS que permiten el acceso a los datos de proceso y velocidad de reacción.

En el código informático VB, la velocidad de reacción se calcula explícitamente y se transfiere de nuevo a HYSYS para ser utilizada en el módulo del reactor de lecho empacado.

El proceso se repite para cada segmento del reactor en toda la longitud del tubo. Específicamente, los datos de presión total, composición inicial y temperatura del fluido se obtienen primero de HYSYS, luego el código de cálculo VB realiza las conversiones de unidades apropiadas y utiliza la estequiometría de reacción para proporcionar la velocidad de reacción del segmento.

Además de estos cálculos de velocidad, se proporciona un código de configuración para minimizar los requisitos de configuración de la reacción y proporcionar una interfaz personalizada para permitir una fácil manipulación de la densidad del catalizador.

Las extensiones en sí fueron preparadas previamente por Hyprotech Ltd. y están disponibles en la literatura abierta [29].

3.5. Supuestos del modelo

Se han hecho ciertas suposiciones en el desarrollo del modelo del reactor para simplificar la implementación de todo el modelo de toda la planta y proporcionar una velocidad de simulación adecuada.

Las suposiciones se enumeran aquí junto con una breve discusión sobre la justificación y las implicaciones.

- Fugacidad de fase gaseosa ideal: Se observó que este modelo tenía un impacto mínimo en la precisión y se seleccionó para permitir una simulación rápida.
- Sistema de eliminación de CO₂ con separador de componentes: Esta suposición fue la misma que la presentada en Luyben y Tyreus (1998) [16]. La precisión de la simulación no se vio afectada, ya que las operaciones unitarias de eliminación de CO₂ se encontraban aguas abajo del proceso VAM.
- Control de temperatura del reactor de servicio directo: para controlar la temperatura de salida del reactor, el servicio se manipuló directamente evitando la simulación directa del fluido de servicio.

La justificación de este enfoque fue simplificar la simulación. Dada la rápida dinámica del sistema ilustrada en Luyben et al. (1999) [15], se adoptó este enfoque y se comparó con los resultados de dicha referencia.

- Control de temperatura del hervidor realizado por servicio directo: la justificación de este enfoque fue simplificar la simulación.

- Dinámica de válvulas instantánea: No se proporcionó información para el diseño [15] relativa a la dinámica de las válvulas; por lo tanto, se seleccionó esta configuración predeterminada para cada válvula.
- Perfil de presión en el reciclaje de gases y líquidos - Luyben et al., (1999) [15] asumieron que toda la caída de presión de los reciclajes se produjo en el reactor de lecho empaquetado.

El requisito del solucionador de flujo de presión de HYSYS es tener un diferencial de presión para cada retención y entre cada nodo de presión. Por lo tanto, se asumió un diferencial de presión para calentadores, enfriadores y el intercambiador de calor de aproximadamente 50 kPa.

- Se asumió que la fracción de vacío del reactor era 1. Debido a consideraciones de velocidad de simulación, el volumen de vacío del reactor se estableció en 1 y el volumen de reacción total se ajustó para que coincidiera con los resultados de Luyben y Tyreus, (1998) [16].

La solución simultánea de la matriz de ecuaciones presión-flujo proporciona la información necesaria para resolver el modelo de retención.

Sin embargo, existe una dependencia inversa del solucionador de presión-flujo en el modelo de retención, ya que el solucionador de flujo de presión necesita datos de reacción y densidad.

Se da prioridad al solucionador de flujo de presión ya que los datos del paso de tiempo anterior del modelo de retención se utilizan junto con modelos simplificados de energía y flash para pasos de tiempo que no son múltiplos de la frecuencia de actualización rigurosa.

En resumen, la clave para resolver la respuesta dinámica de la simulación es la secuenciación de la interacción entre los dos solucionadores.

IV. DISCUSIÓN

4.1. Estado estacionario y análisis dinámico de la destilación azeotrópica

La columna de destilación azeotrópica representa una operación unitaria compleja y crítica en el diseño del proceso de monómero de acetato de vinilo (VAM). Dada su importancia para mantener la pureza del producto y garantizar la recuperación de los componentes de la alimentación, se realizó un análisis detallado de estado estacionario y dinámico.

Este estudio estableció una comprensión de la capacidad de control de la columna en preparación para implementar estrategias alternativas de control en toda la planta.

4.2. Análisis de estado estacionario

4.2.1. Selección del control de temperatura de etapa

Para comenzar el análisis en estado estacionario, se investigó la ubicación óptima de la bandeja para la ubicación del sensor de temperatura para el diseño de la estrategia de control de base, como se muestra en la Figura 6 [15] con los emparejamientos de composición definidos en las ecuaciones.

El procedimiento implicaba pruebas de sensibilidad en lazo abierto [4] para aislar la ubicación de la bandeja con la mayor variación de temperatura frente a los cambios en la variable manipulada por parejas (función del recalentador).

La otra variable manipulada para el lazo de composición 2 x 2 (lazo de reflujo) se mantuvo constante para asegurar el comportamiento de lazo abierto.

La Figura 7 muestra los resultados de la prueba. La etapa 14 fue seleccionada como la ubicación del sensor de temperatura utilizado en todas las simulaciones posteriores de estado estacionario y dinámicas.

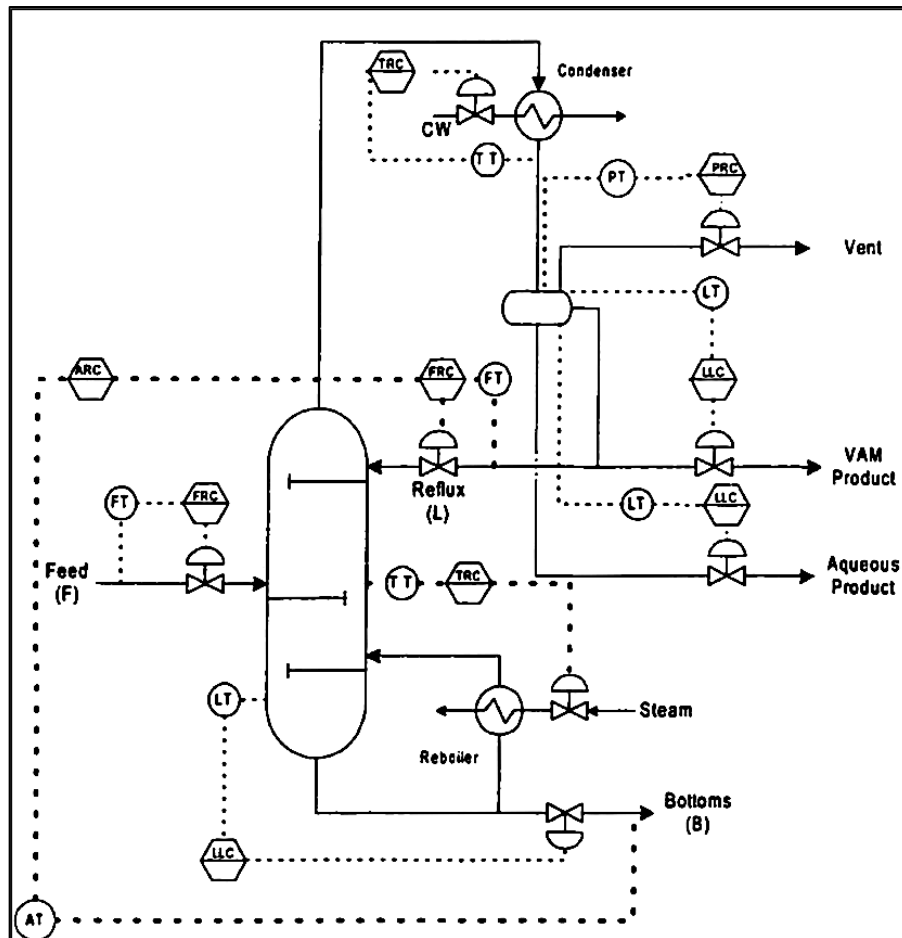


Fig. 6 Estrategia de control de la base de la columna de destilación azeotrópica

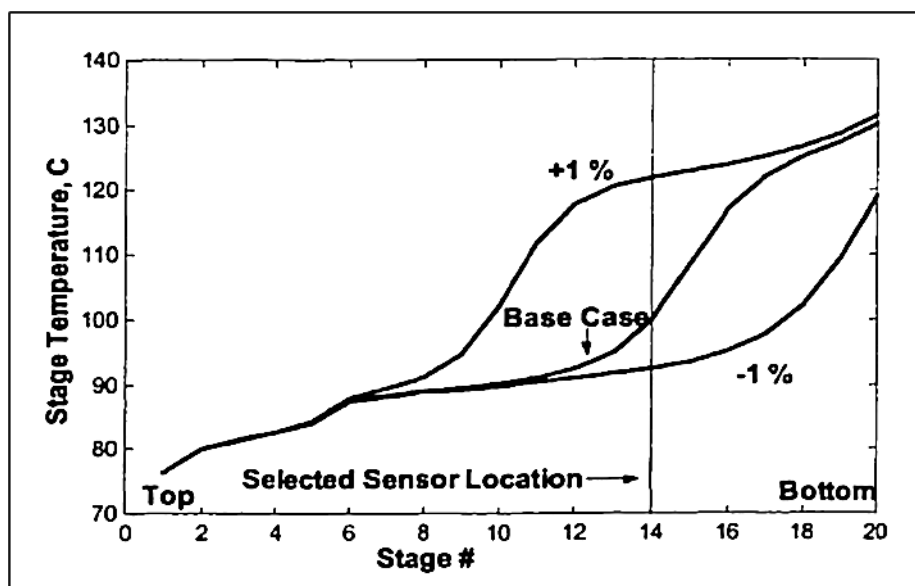


Fig. 7 Sensibilidad a la temperatura de la bandeja de estado estacionario a los cambios en la carga del rehervidor en circuito abierto.

Otra prueba de estado estacionario completada fue investigar la sensibilidad del perfil de composición del VAM a un cambio de paso en el punto de ajuste de temperatura de la etapa 14.

La Figura 8 ilustra los efectos de variar esta variable de temperatura desde el punto de operación de 99°C por $\pm 5^\circ\text{C}$. Como se puede observar en el diagrama, el perfil de composición cambia drásticamente en las bandejas situadas debajo de la alimentación.

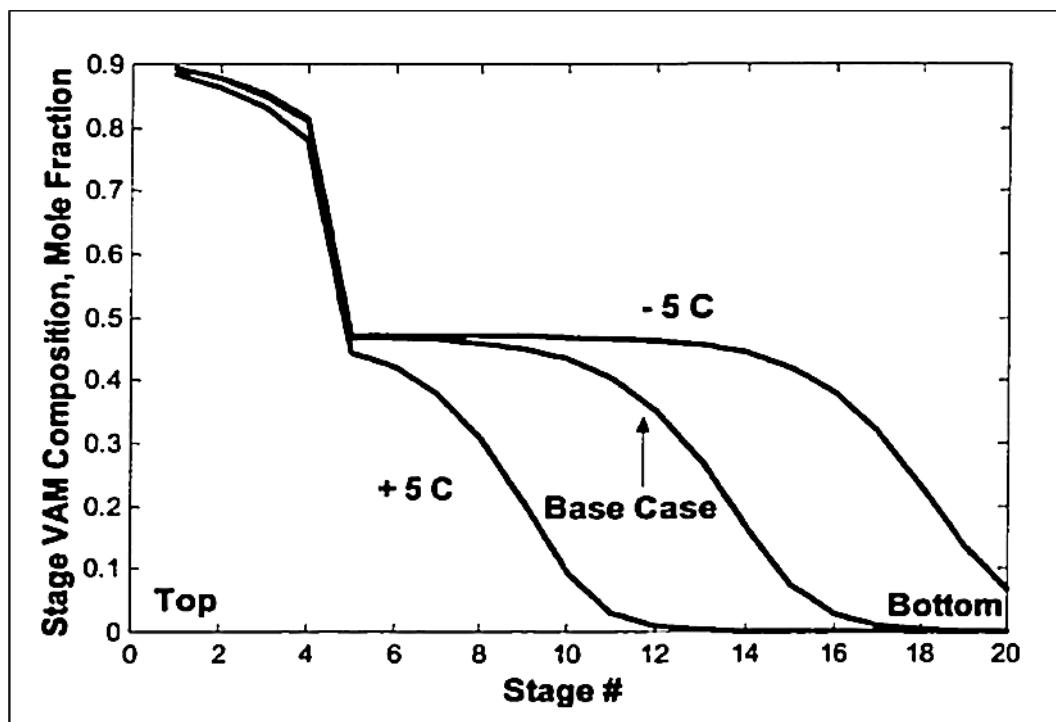


Fig. 8 Perfiles de composición de etapa en estado estacionario de VAM para un cambio de paso de $\pm 5^\circ\text{C}$ en el punto de operación de la etapa 14 de 99°C .

Es de particular importancia el efecto del cambio de paso de -5°C en la concentración de VAM en la etapa inferior, donde la concentración ha aumentado a aproximadamente 0,05 fracción molar, muy por encima de una restricción máxima de 100 ppm.

El efecto de la temperatura en el perfil de composición VAM es muy pronunciado y representa el factor dominante en el control de la columna de destilación azeotrópica y en el cumplimiento de la restricción de concentración de VAM en la corriente de fondo.

4.2.2. Multiplicador de entrada

Como se muestra en la Figura 8, la composición VAM domina el comportamiento de la columna de destilación azeotrópica. Este comportamiento físico genera una alta no linealidad cuando tanto el flujo de reflujo como la potencia del rehervidor operan en lazo abierto.

A modo de ejemplo, la Figura 9 muestra la variable de control de la composición del agua, la cual presenta una concentración máxima en un rango de flujos de reflujo másico típicos, lo que resulta en un cambio de signo en la ganancia de lazo abierto, como se muestra en la ecuación.

$$((\partial[H_2O]_{\text{bottom}})/(\partial Lw))$$

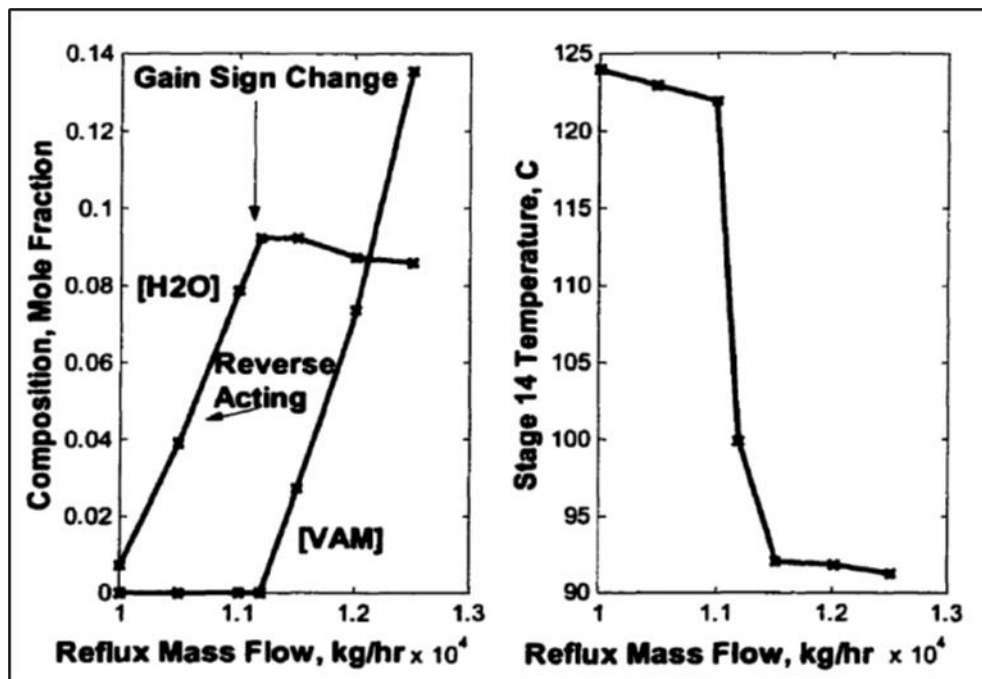


Fig. 9 Comportamiento en estado estacionario de bucle abierto de la fracción molar de agua de corriente de fondos y VAM y temperatura de la etapa 14 para la columna de destilación azeotrópica

Este comportamiento se conoce comúnmente como multiplicidad de entradas y se caracteriza por la existencia de múltiples entradas en estado estacionario para un conjunto fijo de salidas [31].

La multiplicidad de entradas está bien documentada para reactores y destilación [32]; sin embargo, existe muy poca información en la literatura sobre sus impactos en la destilación no reactiva [33].

Afortunadamente, [34] ofrece un análisis detallado del comportamiento de las columnas de destilación que experimentan multiplicidad de entradas.

En esta referencia se menciona la posible existencia de un cambio en la ganancia del proceso para las variables de control de composición, tanto en configuraciones de control de uno como de dos puntos.

También se señala la posibilidad de una respuesta inversa en el componente de ebullición intermedia de mezclas multicomponentes presente en la corriente de fondo.

Ambos comportamientos se observan en la columna de destilación azeotrópica como se ve en las Figuras 9 y 10. En particular, la Figura 9 muestra el cambio del signo de ganancia de bucle abierto.

La Figura 10 ilustra el comportamiento inverso de la composición del agua del fondo debido a un aumento escalonado en el flujo másico de reflujo. Cabe señalar que el agua es una caldera intermedia en relación con el ácido acético y el VAM.

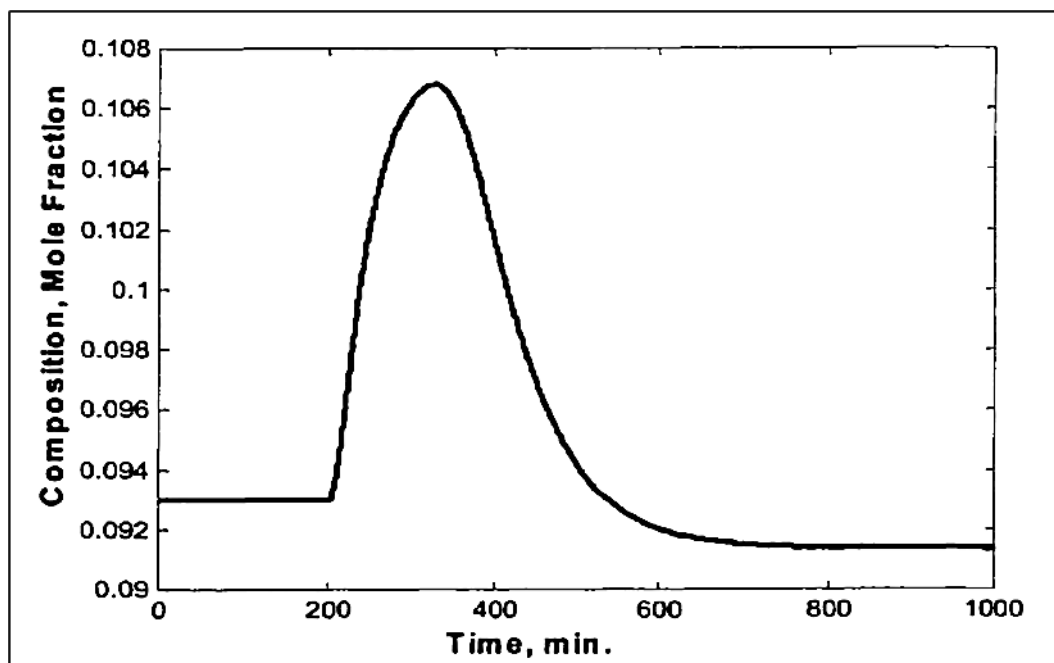


Fig. 10 Respuesta inversa de bucle abierto de la composición H₂O de los fondos a un aumento de 200 kg/h en el caudal másico de reflujo

La causa del comportamiento inverso se debe al comportamiento transitorio traído aproximadamente por el avance de VAM hasta la parte inferior de la columna como se muestra en los datos de estado estacionario de la Figura 9.

Además, el comportamiento de avance también se observa en los datos de estado de la Figura 10 donde se muestra que la composición de VAM en la corriente de fondos aumenta drásticamente después de aproximadamente 11000 kg / h de flujo de reflujo.

En un sentido dinámico como se muestra en Figura 10, con el aumento del reflujo por la columna, la respuesta de la composición del agua aumenta. Sin embargo, la ruptura del perfil de composición de VAM finalmente llega a la corriente inferior invirtiendo el gradiente de concentración del agua.

La Figura 9 también muestra el efecto de la concentración de VAM en el comportamiento de la variable de control de temperatura de la etapa 14.

Con cambios dramáticos en la concentración de VAM debido a cambios en el perfil de composición en la columna, la temperatura medida en la etapa 14 también cambia y se limita entre un límite superior e inferior de aproximadamente 93°C y 123°C.

Este comportamiento de bucle abierto es inestable como se muestra en las Figuras 11 y 12.

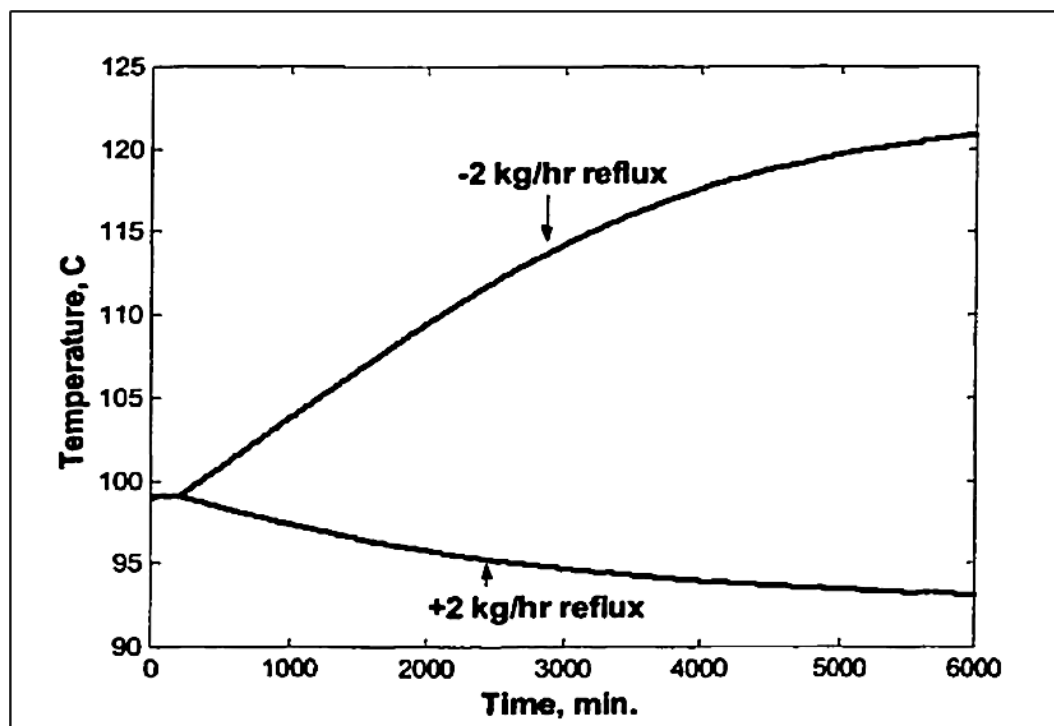


Fig. 11 Respuesta de bucle abierto no lineal: pequeño cambio de paso en el reflujo Caudal (+/- 0,009%) a partir de la fase 14 Temperatura Punto de funcionamiento de 99 °C

La Figura 11 muestra el efecto de hacer un aumento y disminución de un paso muy pequeño en el flujo de reflujo y el movimiento resultante de la temperatura de la etapa 14 hacia el límite superior o inferior.

La Figura 12 muestra el mismo efecto para un cambio mucho mayor en el flujo de reflujo con la única diferencia de que se tarda en alcanzar los nuevos límites del estado estacionario (150 frente a 6000 minutos).

Una vez en cualquiera de estos límites, la ganancia de temperatura se acerca a cero, lo que reduce la sensibilidad y dificulta mucho el control de la temperatura. Por lo tanto, se requiere un control estricto de la temperatura para garantizar que el proceso no tienda hacia estos límites superior e inferior de temperatura.

Estos puntos de operación estables pero indeseables son el resultado de que el perfil de composición de VAM se mueve dramáticamente hacia arriba o hacia abajo de la columna, lo que da como resultado un nuevo equilibrio de fase química desprovisto o dominante de VAM.

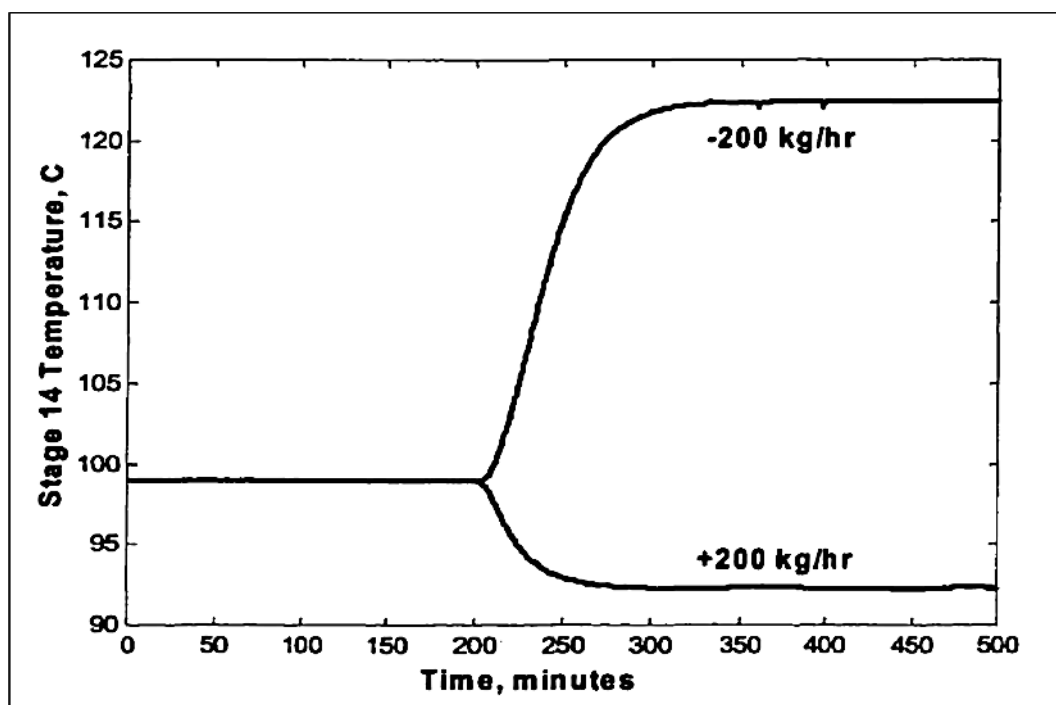


Fig. 12 Respuesta de bucle abierto no lineal: cambio de paso de tamaño mediano en el flujo de reflujo (+/- 0,9%) a partir del punto de operación de temperatura de la etapa 14 de 99°C

4.2.3. Matriz de ganancia relativa y análisis del índice de Niederlinski

Las técnicas comunes de estado estacionario utilizadas para establecer el mejor emparejamiento de variables manipuladas con variables controladas son la matriz de ganancia relativa (RGA) [35] y el índice de Neiderlinski (NI) [36].

Estas técnicas son fáciles de aplicar ya que se basan solo en las ganancias de estado estacionario de bucle abierto y cerrado de cada emparejamiento y sus emparejamientos cruzados.

Los emparejamientos inversos son los siguientes:

y1 (variable de control) = temperatura de la etapa azeotrópica para inferir la composición de VAM en los fondos de columna de destilación azeotrópica.

u1 (variable manipulada) = Caudal másico de reflujo.

y2 (variable de control) = Composición del H₂O en el fondo de la columna de destilación azeotrópica.

u2 (variable de control) = Servicio de rehervidor.

Se calcularon y compararon los valores de RGA y NI para estos emparejamientos. Las ecuaciones siguientes definen el cálculo de las ganancias en estado estacionario, el primer elemento de RGA y de M, respectivamente.

$$k_{ij} = \frac{\Delta c_i}{\Delta m_j}$$

$$\lambda_{ij} = \frac{((\partial c_i)/(\partial m_j))_m}{((\partial c_i)/(\partial m_j))_c}$$

$$NI = \frac{|K|}{\prod_{i=1}^n k_{ii}}$$

Dónde:

K_{ij} = Ganancia en estado estacionario de bucle abierto o cerrado entre la variable i y j.

c_i = Variable controlada i.

m = Variable(s) manipuladas mantenidas constante.

C = Variable(s) controladas constantes.

λ_{ij} = Ganancia relativa entre la variable i y la variable manipulada j.

$|K|$ = Determinante de la matriz de ganancia en estado estacionario.

K_{ii} = Elementos diagonales de la matriz de ganancia en estado estacionario.

Para obtener las ganancias de estado estacionario, se realizaron cálculos utilizando cambios de paso en el flujo de reflujo y el servicio del hervidor en una dirección adecuada para garantizar que el perfil VAM no se abriera paso hasta el fondo de la columna.

Por lo tanto, solo se realizó una disminución gradual en el reflujo seguida de un aumento gradual en el servicio de rehervidor para obtener los valores de RGA y NI.

Estas pruebas se realizaron porque se concluyó que los resultados de baja concentración de VAM eran indicativos del rendimiento de la columna en condiciones normales de funcionamiento.

La respuesta de alta frecuencia fue clave para el comportamiento de la columna y se representó mejor mediante la realización de pruebas de paso en estado estacionario que aseguran que la concentración de VAM se mantenga al mínimo.

Los resultados para el emparejamiento de bases que muestran el RGA para el primer elemento y los valores de NI para diferentes tamaños de paso en el flujo de reflujo se dan en la Tabla 5.

Tabla 5 Ganancia de bucle abierto del elemento K11

Flujo de Step Reflux	K11	RGA (primer elemento)	NI
-86.3 kg/hr	2.05	-3.67	-0.39
-239.4 kg/hr	2.01	-3.37	0.65
-1022.3 kg/hr	1.57	-2.87	4.5

(*) del emparejamiento de control base, matriz de ganancia relativa (primer elemento) e índice de Neiderlinski para varias magnitudes en el flujo de reflujo escalonado.

Se han probado tres magnitudes diferentes de pasos de flujo de reflujo para ilustrar mejor los efectos de la temperatura ya discutidos. Los resultados del emparejamiento inverso también se presentan en una tabla para resaltar aún más los efectos de esta no linealidad (Table 6).

De particular interés en la Tabla 5 es el gran valor negativo del primer elemento RGA para los tres tamaños de paso de reflujo. Este emparejamiento representa

una mala elección, ya que el sistema será inestable si uno de los bucles se abre y el resto se cierra [15].

Tabla 6 Ganancia de lazo abierto del elemento K11 del emparejamiento de control inverso

Flujo escalonado por reflujo	K11	RGA (1er elemento)	NI
-86.3 kg/hr	-29.95	1.00	0.74
-239.4 kg/hr	-10.80	1.02	-0.36

(*) matriz de ganancia relativa (primer elemento) e índice de Neiderlinski para varias magnitudes en el flujo de reflujo escalonado.

Este efecto tendría lugar para la columna de destilación azeotrópica cuando se abriera el circuito de control de temperatura y el circuito de control de la composición del agua permaneciera cerrado.

En esto, la acción del controlador requerida del circuito de control de composición del agua cambia de acción directa a acción inversa (como se indica en la parte de baja concentración de VAM de la Figura 8).

Con este interruptor en la dinámica del controlador requerida, el controlador de composición no puede aplicar la acción correctiva adecuada, lo que resulta en la saturación de la válvula. La simulación dinámica para esta disposición del controlador confirmó este comportamiento inestable.

La implicación de este hallazgo es que este emparejamiento no se recomienda en base a un análisis de estado estacionario debido a la inestabilidad de bucle abierto que resulta. Sin embargo, las pruebas de estado estacionario de circuito cerrado mostraron que el emparejamiento sería beneficioso (Figura 12).

Como se puede ver en la figura, la acción del controlador es de acción directa en completo contraste con la parte de baja concentración de VAM de la Figura 7 donde existe una relación de acción inversa.

Sin embargo, en más contraste con estas cifras, es evidente que la no linealidad de la multiplicidad de entrada ha sido eliminado, lo que da como resultado una relación lineal entre la composición de H₂O y el reflujo.

Esta linealización, junto con la rápida dinámica de la ebullición del vapor para controlar la temperatura de la etapa 14, proporciona la clave para un control satisfactorio.

Con un retraso tan corto entre el hervidor y la temperatura de la bandeja, se puede lograr un control de temperatura muy estricto esencialmente ajustando el perfil de composición VAM y eliminando los efectos adversos de la multiplicidad de entrada.

Además, una simulación dinámica de bucle cerrado muestra que el emparejamiento es capaz de manejar los requisitos de control. Este efecto es clave en el funcionamiento estable de bucle cerrado y no se logró con el emparejamiento inverso.

Debido a los efectos del cambio de temperatura provocados por el rápido cambio en la concentración de VAM, el NI cambia de signo según el tamaño del cambio de paso de flujo de reflujo.

El efecto dominante se observa en los valores K11 del emparejamiento LwV inverso en la Tabla 6, ya que este valor representa esencialmente el emparejamiento cruzado K21 para la información en la Tabla 5.

En la Tabla 6 se observa claramente que la ganancia de lazo abierto no es constante y es una función del tamaño del paso del flujo de reflujo. Además, la magnitud de la ganancia domina el cálculo del IN, lo que resulta en una inversión de signo. Nuevamente, el problema se debe a la rápida extracción del acetato de vinilo de la bandeja 14, donde se mide la temperatura.

Independientemente del tamaño del paso en el flujo de reflujo, se alcanza la temperatura límite superior de 123 ° C. Este efecto conduce a dos resultados interesantes.

La primera es, como se mencionó, que el valor K11 de ganancia de bucle abierto no es constante para un cambio de paso dado.

En segundo lugar, independientemente del tamaño del paso en el reflujo, se produce el mismo cambio de temperatura, ya sea en bucle abierto o en circuito cerrado, lo que conduce a un valor del primer elemento RGA cercano a 1.

Por lo tanto, a partir de estos resultados queda claro que el análisis de RGA en estado estacionario no es indicativo del alto nivel de acoplamiento que se ha observado para el emparejamiento inverso utilizando simulación dinámica.

Con un NI negativo, la conclusión es que el emparejamiento del sistema será inestable y no será controlable integralmente [15]. Sin embargo, con el interruptor en el signo del NI, es difícil concluir si el emparejamiento base o el emparejamiento inverso será inestable.

Por lo tanto, se realizó una prueba de ambos emparejamientos para la estabilidad integral en dinámica estableciendo la ganancia del controlador en $1e-15$ y luego verificando la inestabilidad.

Los resultados solo mostraron una ligera deriva en ambos sistemas, lo que lleva a la conclusión de que los sistemas son estables integralmente.

4.2.4. Resumen del análisis de estado estacionario

El análisis en estado estacionario ha demostrado que el perfil de composición de VAM domina el comportamiento de controlabilidad de la columna de destilación azeotrópica.

La no linealidad de la columna se ha caracterizado por la presencia de multiplicidad de entrada provocada por el desplazamiento de la ruptura del perfil de composición VAM dentro de la columna cuando los bucles de control de composición dual están abiertos.

El efecto neto en el análisis de RGA y NI fue producir resultados difíciles de interpretar y sacar conclusiones definitivas sobre la mejor selección del emparejamiento de bucles.

Sin embargo, el análisis resultó muy informativo y condujo a la conexión entre la no linealidad del comportamiento del bucle abierto con el comportamiento del perfil de composición VAM dentro de la columna.

Además, se demostró que el mecanismo de cómo funciona el circuito de control de la composición del agua en presencia de un primer elemento RGA negativo está relacionado con el comportamiento linealizado del circuito de composición cuando está cerrado.

Por lo tanto, se obtuvo un fuerte apoyo para el emparejamiento de bases de los resultados. La decisión final y la justificación se determinaron mediante simulación dinámica.

4.3. Análisis dinámico

Dado el comportamiento no lineal del proceso y la incapacidad de los análisis RGA y NI para identificar la mejor estrategia de control de composición, se ha recurrido a la simulación dinámica.

En este ítem se han evaluado diferentes configuraciones del lazo de control de composición 2 x 2 para la columna de destilación azeotrópica. Posteriormente, se puede seleccionar la mejor combinación.

4.3.1. Selección del emparejamiento del bucle de control de composición

Hay tres opciones potenciales propuestas para el emparejamiento del bucle de control de composición 2 x 2 para la columna de destilación azeotrópica. Son la configuración de control base que se muestra en la Figura 6 utilizando el flujo másico para el reflujo (L_w).

El emparejamiento inverso para la configuración L_wV y el emparejamiento de bases con flujo de reflujo reemplazado por flujo destilado D_w . Con base en las observaciones presentadas en las dos secciones anteriores, se ha concluido que el emparejamiento de bases es el enfoque recomendado.

La principal justificación es el control de temperatura ajustado (composición de fondos VAM) que se ofrece al emparejar el servicio de hervidor con la temperatura de una bandeja.

Esta acción ha demostrado ser robusta (Figura 14) para garantizar que el perfil de composición de VAM no se desplace hacia arriba o hacia abajo de la columna, evitando así los efectos de no linealidad observados durante las pruebas de bucle abierto.

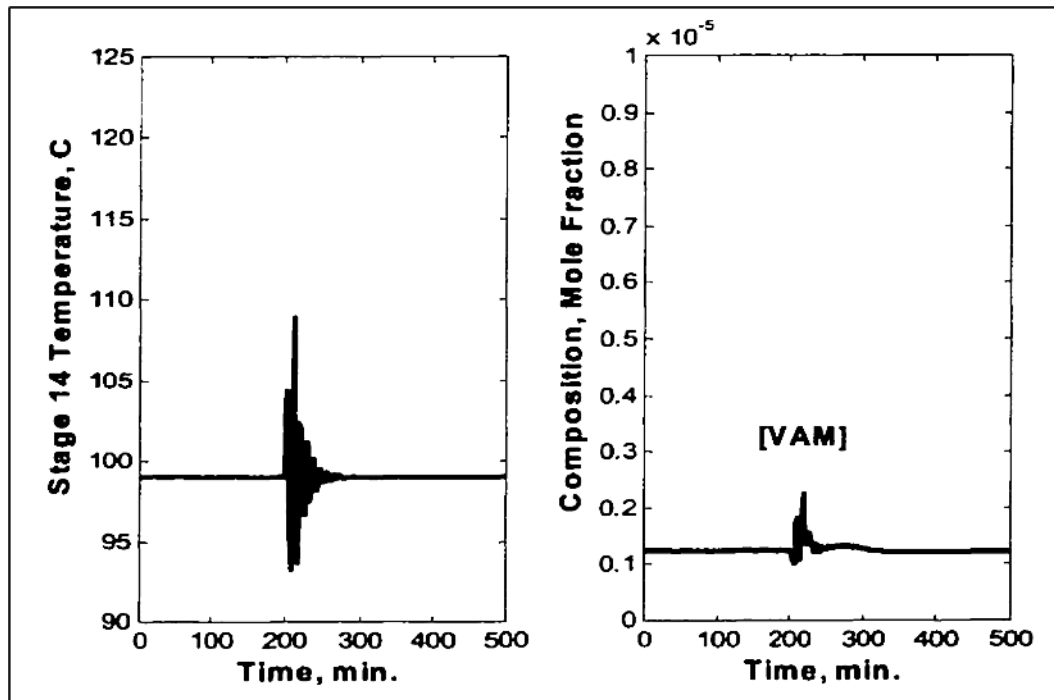


Fig. 13 Emparejamiento de bases para bucles de control de destilación azeotrópica en respuesta a una caída del flujo de alimentación del 40 % durante 5 minutos

El emparejamiento inverso ha sido rechazado como una opción debido al alto grado de interacción observado en la simulación dinámica entre los dos bucles de control. Debido a este alto grado de interacción, era imposible controlar el perfil VAM y evitar que se produjera desplazamiento y provocando que las restricciones de VAM 100 ppm del flujo de fondo (Figura 15) se desvíen de las especificaciones.

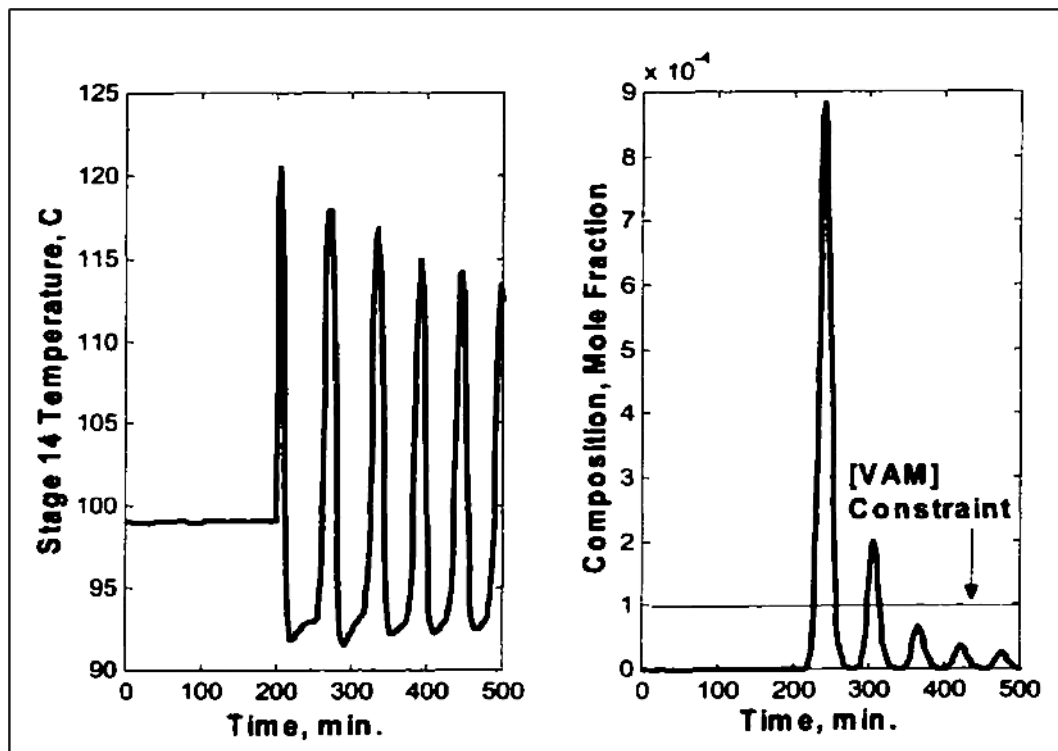


Fig. 14 Emparejamiento inverso para bucles de control de la columna de destilación azeotrópica en respuesta a una caída del flujo de alimentación del 40% durante 5 minutos.

El uso del flujo másico destilado (D_w) como variable manipulada en reemplazo del reflujo (L_w) también ha sido rechazado a favor del control base por tres razones. En primer lugar, dado que el flujo de destilado está vinculado al flujo de reflujo a través de la dinámica del nivel del condensador, estaría sujeto a la misma multiplicidad de entrada que se ve en el emparejamiento de bases y no proporcionaría ninguna ventaja.

En segundo lugar, se encontró que la inclusión del comportamiento dinámico a nivel del condensador directamente en el comportamiento de control del circuito de composición del agua producida.

Se produce un sobre impulso adicional durante los cambios de punto de ajuste. La causa se atribuye a la relación indirecta que surge entre D_w y la composición del agua en los fondos de las columnas a través de la capacitancia adicional de la retención del condensador.

Este enfoque agrega un retraso adicional que, en última instancia, ralentiza la respuesta del flujo de reflujo líquido por la columna hasta el hervidor en relación con el control directo de L_w .

En tercer lugar, dado que el producto pasa directamente a las etapas de purificación del producto inmediatamente después de la recuperación, es deseable mantener el control del promedio de nivel para esta aplicación.

Aunque se muestra que el emparejamiento de bases es inestable con el bucle de temperatura abierto y el bucle de composición cerrado (como se indica con un primer elemento RGA negativo), se podrían implementar restricciones en la variable manipulada de servicio de hervidor.

Esta acción aseguraría que el circuito de temperatura proporcione una ebullición adecuada evitando que las concentraciones de VAM sean demasiado altas en la corriente de fondo.

Además de ser un enfoque útil durante la operación normal, una restricción mínima de servicio del hervidor sería útil durante el arranque y el apagado para evitar la contaminación por VAM en el reciclaje de ácido acético y evitar la estabilización de la columna en una condición de operación inapropiada [37].

4.3.2. Sintonización

Los parámetros de sintonización para los parámetros de sintonización del controlador proporcional / integral (PI) se establecieron para garantizar el mejor rendimiento y, cuando fue posible, el bucle se simplificó mediante el uso de un controlador solo proporcional.

Por lo tanto, todas las variables de capacidad, como el nivel y la presión, se controlaron mediante control proporcional con la ganancia establecida en 2. El objetivo de este enfoque era implementar el control de promedio para permitir el suavizado del flujo a las unidades aguas abajo y un mejor mantenimiento del inventario en casos de cargas altas o bajas.

Los bucles de control de teclas se ajustaron utilizando un enfoque adaptado de la técnica de variación de sintonización automática [38].

El método se basa en una técnica de retroalimentación de relé que incorpora por defecto un relé con histéresis para reducir la influencia del ruido de medición en la derivación de los parámetros. Los parámetros del controlador PID se obtienen seleccionando un margen de ganancia en un ángulo de fase específico. Los parámetros utilizados para los bucles de control clave se indican en la Tabla 7.

Tabla 7 Parámetros clave del bucle de control

Bucle de control	Kc	Ti (min.)
H2O en los fondos-reflujo	0.6	34.8
Etapa 14 Servicio de hervidor de temperatura	5.3	
Temperatura de salida del reactor: servicio de enfriamiento del reactor	0.1	0.4
Concentración de O2 en el reciclaje de gas - Flujo de alimentación de oxígeno	2.9	0.1

V. CONCLUSIONES

- ✓ En el presente trabajo se presentan los detalles del diseño del proceso VAM utilizado en este estudio. Se han presentado detalles del modelo de toda la planta para el proceso VAM. En primer lugar, se presentó el modelo termodinámico con el razonamiento para seleccionar los modelos UNIFAC - Fugacidad ideal de líquidos y vapores.
- ✓ También se presentó la estrategia de integración de *HYSYSTM*, su efecto en el modelo de retención y su relación con el solucionador de flujo de presión. A continuación, se presentó la implementación de las ecuaciones cinéticas en extensiones ActiveX con *HYSYSTM*. Finalmente, se enumeraron los supuestos utilizados en la construcción de los modelos.
- ✓ También se presentan los resultados de un análisis detallado de estado estacionario y dinámico de los emparejamientos de bucle de control posibles en la columna de destilación azeotrópica. Los resultados del estado estacionario mostraron que el sistema exhibe una multiplicidad de entrada caracterizada por un cambio en el signo de una ganancia de estado estacionario, así como por el comportamiento inverso del componente medio de la caldera, el agua. El punto de funcionamiento del sensor de temperatura se seleccionó para la etapa 14 con un valor de 99°C. Se determinó que los cambios en el perfil de composición de VAM eran la causa del comportamiento no lineal.
- ✓ El emparejamiento de bases original como se da en (Luyben et al., 1999) se ha determinado como la mejor selección de emparejamiento basada en el estado estacionario y el análisis dinámico. Los resultados del estado estacionario mostraron que a pesar de un gran RGA negativo y la inestabilidad de bucle abierto asociada, el rendimiento de bucle cerrado demostró ser más estable para cumplir con los objetivos de control. Luyben et al. (1999) no proporcionaron este tipo de análisis, justificando el emparejamiento basado en la premisa de emparejar la dinámica del flujo de vapor para el control de la temperatura de la etapa.
- ✓ El emparejamiento inverso demostró estar acoplado y ser muy difícil de controlar. Debido a la necesidad de un control de nivel de promedio, no se eligió el uso de flujo másico destilado. Se identificó una restricción de servicio del hervidor como un medio simple para evitar que la restricción de composición de fondos VAM de 100 ppm se salga de la especificación.

VI. RECOMENDACIONES

- ✓ La estimación del parámetro de interacción binaria VAM/H₂O se realizó utilizando UNIFAC LLE. El resto de los parámetros se obtuvieron de la literatura y de la base de datos termodinámicos de Hyprotech Ltd. Se presentaron detalles matemáticos de las ecuaciones de conservación de las operaciones de la unidad de destilación y reactor de flujo de pistón de lecho empacado.
- ✓ La cinética de reacción seleccionada en el diseño involucró las dos expresiones de velocidad cinética complejas dadas en las ecuaciones. En el estudio solo se incluyó la producción de CO₂ como subproducto, ya que se reporta que el acetato de etilo se produce en pequeñas cantidades. Se presenta el diagrama de flujo general del proceso, que muestra los siete equipos principales y las corrientes de recirculación utilizadas en la producción de VAM. Y se presenta la estrategia de control base para toda la planta [15], que se utilizará en la comparación de estrategias alternativas, junto con un análisis de los tres lazos de control críticos.

VII. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] S. Kothare y M. Morari, «Contractive model predictive control for constrained nonlinear systems,» *IEEE Transactions on Automatic Control*, nº 45, pp. 1053-1071, 2000.
- [2] J. Perkins y S. Walsh, «Optimization as a tool for design/control integration,» *Computers & Chemical Engineering*, vol. 20, nº 4, pp. 315-323, 1996.
- [3] W. Svrcek y et al., *A Real- Time Approach to Process Control*, Chichester: John Wiley & Sons, 2000.
- [4] P. Fruehauf y O. Mahoney, «Distillation column control design using steady state models: Usefulness and limitations,» *ISA Trans.*, vol. 32, nº 1, pp. 57- 175, 1993.
- [5] C. Buck y et al., «Applying model predictive control to dividing wall columns,» *Chemical Engineering & Technology*, vol. 34, nº 5, pp. 663-672, 2011.
- [6] A. Hugo, «Limitations of model predictive controllers,» *Hydrocarbon Processing*, pp. 83-88, 2000.
- [7] S. Bluemel y S. Fischer, *Handbuch der Fülltechnik – Grundlagen und Praxis für das Abfüllen flüssiger Produkte*, Behr's Verlag, 2004.
- [8] T. Marlin y et al., *The Application of Advanced Control Techniques to Industrial Systems - Opportunities and Barfi*, Sydney: The Warren Center of Advanced Engineering, 1987.
- [9] J. Anderson y et al., «Getting the most from Advanced Process Control,» *Chem Engineering*, pp. 78 - 89, 1994.
- [10] B. Tyreus, «Selection of Controller Structure,» 1992.
- [11] D. Dwivedi y et al., «Active vapor split control for dividing-wall columns,» *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 51, nº 46, pp. 15176-15183, 2012.
- [12] H. Ling y W. L. Luyben, «New control structure for divided-wall columns,» *Industrial & Engineering Chemistry Research*, nº 48, pp. 6034-6049, 2009.
- [13] Anonymous, «Malee Vinyl Acetate from Ethylene,» *Hydrocarbon Processing*, vol. 46, nº 4, pp. 146-149, 1967.

- [14] Anonymous, *Chemical Week*, p. 46, 2000.
- [15] W. .. Luyben y et al., *Plantwide Process Control*, New York, USA: McGraw Hill, 1999.
- [16] M. Luyben y B. Tyreus, «An industrial design/control study for the vinyl acetate monomer process,» *Computers Chem. Engng.*, vol. 22, nº 7-8, pp. 867 - 877, 1998.
- [17] S. Nakamura y T. Yasui, «The Mechanism of the Palladium-Catalysed Synthesis of Vinyl Acetate from Ethylene in a Heterogeneous Gas Reaction,» *Journal of Catalysis*, nº 17, pp. 366 - 374, 1970.
- [18] B. Samanos y et al., «The Mechanism of Vinyl Acetate Formation by Gas-Phase Catalytic Ethylene Acetoxidation,» *Journal of Catalysis*, nº 23, pp. 19 - 30, 1971.
- [19] J. .. Douglas, *Conceptual Design of Chemical Processes*, New York, USA: McGraw Hil, 1988.
- [20] W. Fisher y et al., «The Interface between Design and Control. 3. Selecting a Set of Controlled Variables,» *Ind. Eng. Chem. Res.*, nº 21, pp. 611 - 615, 1988.
- [21] H. Renon y J. Prausnitz, «Local Compositions in Thermodynamics Excess Functions for liquid Mixtures,» *AIChE Journal*, nº 14, pp. 135 - 144, 1968.
- [22] D. Abrams y J. Prausnitz, «Statistical Thennodynamics of Liquid Mirhces: A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly or Completely Miscible Systems,» *AIChE Journal*, nº 21, pp. 116 - 128, 1975.
- [23] Null, H.R (1970) *Phase Equilibrium in Process Design*, New York, USA: Jonh Wiley & Sons.
- [24] G. Wilson, «Vapour-Liquid Equilibrium XI: New Expression for the Excess Free Energy of Mixing,» *J. Am. Chem. Soc.*, nº 86, pp. 127 - 130, 1964.
- [25] A. Fredenslund y et al., «Group Contribution Estimations of Activity Coefficients in Non-Ideal Liquid Mixtures,» *AiChE Journal*, nº 21, pp. 1086-1098, 1975.
- [26] S. Steinigeweg y J. Gmehling, «Transesterification processes by combination of reactive distillation and pervaporation,» *Chemical Engineering and Processing*, nº 43, pp. 447-456, 2004.

- [27] J. Hayden y J. O'Connell, «A Generalized Method for Predicting Second Virial Coefficients,» *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, nº 14, pp. 209 -216, 1975.
- [28] S. M. Walas, *Phase Equilibrium in Chemical Engineering*, Boston, USA: Butterworth-Heiemann, 1985.
- [29] HYSYS, *Plant Simulation Basis*, Calgary, Canada: Hyprotech, 1998.
- [30] G. Franks, *Modelling and Simulation in Chemical Engineering*, New York, USA: John Wiley & Sons, 1972.
- [31] L. Koppel, «Input Multiplicities in Nonlinear Multivariable Control Systems,» *AiChE Journal*, vol. 28, nº 6, pp. 935 - 945, 1982.
- [32] M. Sneesby y et al., «ETBE Synthesis via Reactive Distillation. 1. Steady-State Simulation and Design Aspects,» *Ind. Eng. Chem. Res.*, nº 36, pp. 1855-1869, 1997.
- [33] A. Zheng y et al., «On Control of Distillation Columns with Input Multiplicity,» *Ind. Eng. Chem. Res.*, nº 37, pp. 1836 - 1840, 1998.
- [34] E. Jacobsen, «Input Multiplicity and Right Half Plane Zeros in Binary Distillation,» de *Proceedings European Control Conference*, Groningen, Holland, 1993.
- [35] E. Bristol, «On a new Measure of Interactions for Multivariable Process Control,» *IEEE Trans. Auto. Con.*, p. 133, 1966.
- [36] A. Niederlinski, «A Heuristic Approach to the Design of Linear Multivariable Interacting Control Systems,» *Automatica*, vol. 7, nº 69, p. 1, 1971.
- [37] B. Bisowarno y M. Tade, «Dynamic Simulation of Startup in Ethyl tert-Butyl Ether Reactive Distillation with Input Multiplicity,» *Ind. Eng-Chem. Rex*, nº 39, pp. 1950 - 1954, 2000.
- [38] K. Astrom y T. Hagglund, «Automatic Tuning of Simple Regulators with Specifications of Phase and Amplitude Margins,» *Automatics*, vol. 20, nº 5, pp. 645 - 651, 1984.



FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA
UNIVERSIDAD NACIONAL SAN LUIS GONZAGA
EVALUACIÓN DE ORIGINALIDAD

CONSTANCIA

El que subscribe, deja constancia que se ha realizado el análisis con el software de verificación de similitud al documento cuyo título es:

“ANÁLISIS DINÁMICO Y ESTADO ESTACIONARIO DEL BUCLE DE CONTROL EN LA COLUMNA DE DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL MONÓMERO DE ACETATO DE VINILO”

BACH. LARA QUISPE, LEANDRO DEIVIS

Autor de la Tesis del nivel de **PREGRADO** de la Facultad de **INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA**. El Resultado obtenido es 0% (PORCENTAJE DE SIMILITUD) por lo cual, se otorga el calificativo de: **APROBADO**, según Reglamento de Evaluación de la Originalidad.

Se adjunta al presente el reporte de evaluación con el software de verificación de originalidad.

Observaciones:

El porcentaje de similitud es menor del 20%, establecido como máximo por Reglamento de Evaluación de originalidad.

Ica, 18 de mayo de 2026

Nº de Recibo:20164206

[Firma manuscrita]